www.sapientia.uji.es | 99



Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos

A. Barba Juan
C. Clausell Terol

Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos

A. Barba Juan
C. Clausell Terol



Departament d'Enginyeria Química

■ Codi d'assignatura EQ1030

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

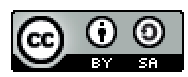
Edita: Publicacions de la Universitat Jaume I. Servei de Comunicació i Publicacions
Campus del Riu Sec. Edifici Rectorat i Serveis Centrals. 12071 Castelló de la Plana
http://www.tenda.uji.es e-mail: publicacions@uji.es

Col·lecció Sapientia 99
www.sapientia.uji.es
Primera edició, 2015

ISBN: 978-84-697-1981-7



Publicacions de la Universitat Jaume I és una editorial membre de l'UNE, cosa que en garanteix la difusió de les obres en els àmbits nacional i internacional. www.une.es



Reconeixement-CompartirIgual
CC BY-SA
Aquest text està subjecte a una llicència Reconeixement-CompartirIgual de Creative Commons, que permet copiar, distribuir i comunicar públicament l'obra sempre que s'especifique l'autor i el nom de la publicació fins i tot amb objectius comercials i també permet crear obres derivades, sempre que siguen distribuïdes amb aquesta mateixa llicència.
http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/legalcode

ÍNDICE

Prólogo

Este libro, titulado *Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos*, junto con el libro publicado en el año 2014 *Reactores químicos y bioquímicos*, está concebido para los estudiantes de la Universitat Jaume I que cursan el tercer año del Grado en Ingeniería Química. En el segundo semestre de ese año deben cursar la asignatura obligatoria *EQ1030-Reactores Químicos y Bioquímicos* de 6 European Credit System Transfer (ECTS).

En el libro *Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos* se plantea y resuelve la colección de problemas recogida en el libro anterior, *Reactores químicos y bioquímicos*. Para cada problema, se presenta un resumen en el que se recogen y esquematizan los datos del enunciado, se muestran las ecuaciones necesarias para la resolución del mismo, dando a los alumnos las pautas necesarias para su resolución, y se incluye la solución gráfica y/o numérica correspondiente con el fin de que el alumno pueda evaluar la resolución realizada.

El libro *Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos*, al igual que el anterior, es el resultado de la experiencia de los autores que, durante los últimos 20 años, han venido impartiendo cursos de ingeniería de la reacción química y de reactores químicos. Pretende ser una herramienta de estudio del alumno que le permita conocer, analizar, modelizar y calcular sistemas con reacción química no isotermos.

A. BARBA JUAN, C. CLAUSELL TEROL
Castellón, 2015

CAPÍTULO 1

Balances de energía en reactores químicos de flujo ideal

Problema 1.01. Un RDTA adiabático se carga con una solución acuosa que contiene 500 kg de anhídrido acético, a 15.5 °C (288.5 K), cuya concentración es de 0.49 kmol de anhídrido acético/m^3. La reacción que se ha de desarrollar en dicho reactor se puede representar por el esquema:

$$(CH_3CO)_2O(\ell) + H_2O(\ell) \rightarrow 2CH_3COOH(\ell)$$

y su cinética es de primer orden respecto al anhídrido acético. Por cada kmol de anhídrido acético que se hidrolice se desprenden 209370 kJ (puede admitirse que ΔH° prácticamente no varía con la temperatura en el intervalo de operación).

Calcular el tiempo necesario para alcanzar un grado de conversión del 80 %.

Datos y notas

La densidad de la disolución inicial es de 1050 kg/m^3 y su calor específico es 3767 J/kg K. Ambas propiedades físicas puede admitirse que permanecen constantes durante toda la reacción.

La variación de la constante de velocidad con la temperatura viene dada en la tabla siguiente:

T (K)	277.6	283.1	288.7	294.3	299.8	305.4
k (min^{-1})	0.035	0.057	0.084	0.123	0.174	0.245

REACTOR

TIPO: RDTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA
BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot X$

BALANCE DE MATERIA: $dt = c_{k_0} \cdot \dfrac{dX}{(-\nu_k) \cdot r}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $(CH_3CO)_2O + H_2O \rightarrow 2CH_3COOH$

$A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$

$\rho_{disol} = 1050\ kg/m^3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = -209370\ kJ/kmol$

$\overline{C}_{p,disol} = 3.767\ kJ/kg \cdot K$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 = k \cdot c_{10} \cdot (1-X) = 5.53 \cdot 10^7 \cdot \exp\left[-\dfrac{5867.7}{T}\right] \cdot 0.49 \cdot (1-X)\ \left(\dfrac{kmol}{m^3 \cdot min}\right)$

DATOS Y NOTAS

REACTOR a t = 0	REACTOR
$T_0 = 288.5\ K$	$X = 0.8$
$c_{10} = 0.49\ kmol/m^3$	$t = ?$
$m_{10} = 500\ kg$	

RESULTADOS

Tabla 1.1. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

T(K)	k (min^{-1})	1/T (K^{-1})	ln k
277.6	0.035	0.00360	–3.35
283.1	0.057	0.00353	–2.86
288.7	0.084	0.00346	–2.48
294.3	0.123	0.00340	–2.10
299.8	0.174	0.00334	–1.75
305.4	0.245	0.00327	–1.41

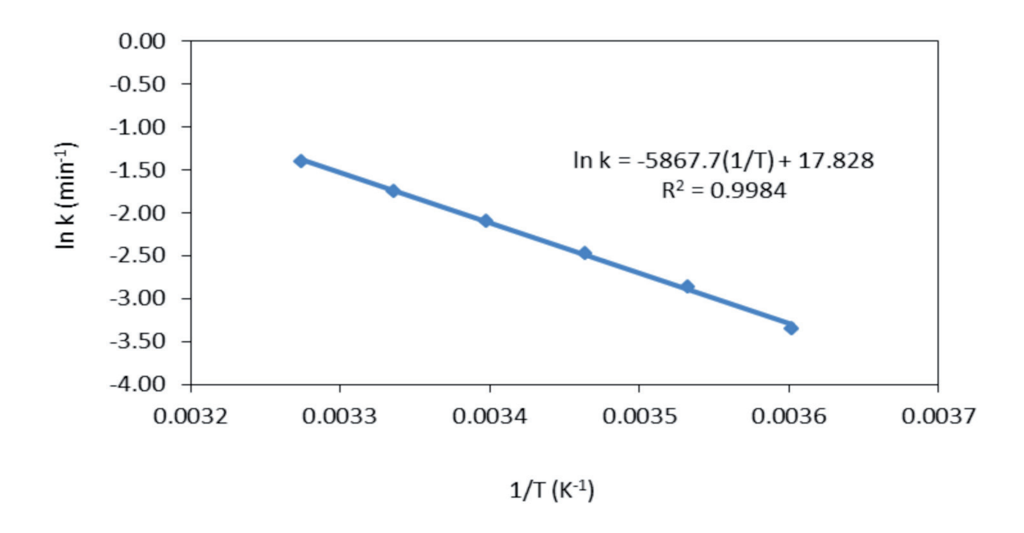


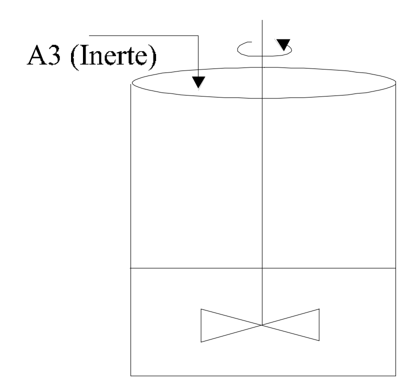
Figura 1.1. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

SOLUCIÓN: t = 9 min

Problema 1.02. En un reactor de mezcla completa, perfectamente aislado térmicamente, tiene lugar una reacción química de primer orden, irreversible, exotérmica y en fase líquida, de la forma:

$$A_1 \rightarrow A_2$$

Con la finalidad de que la temperatura de la mezcla reactante permanezca constante durante todo el período de reacción, se añade a la mezcla, continuamente, un líquido inerte (perfectamente miscible con la mezcla reactante) que actúa como refrigerante. El caudal con que se alimenta el líquido frío se va modificando de acuerdo con las necesidades de refrigeración del sistema. En la figura adjunta se esquematiza la instalación.



Calcular:

a) El caudal volumétrico de líquido inerte refrigerante (Q_{V0}) al cabo de dos horas de iniciarse la reacción.
b) El volumen de la mezcla reactante que hay en el reactor cuando han transcurrido dos horas desde el comienzo del ciclo de reacción.

Datos y notas

Temperatura de reacción: 310 K
Constante de velocidad de reacción: $1.2 \cdot 10^{-4}$ s^{-1} (a 310 K)
Temperatura de entrada del líquido inerte: 300 K
Calor específico de todos los compuestos: 2.1 kJ/kg K
Densidad de todos los componentes: 800 kg/m^3
Calor de reacción a 310 K: –58000 kJ/kmol de A_1

Inicialmente el reactor solo contiene A_1 con una concentración de 8 kmol de A_1 /m^3.
El reactante A_1 ocupa inicialmente (para t = 0) un volumen de reactor de 1.5 m^3.

REACTOR

TIPO: RSCTA, ISOTERMO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE ENERGÍA: $\sum N_j \cdot C_{p_j} \cdot \frac{dT}{dt} = Q^* + (T_0 - T) \sum F_{j_0} \cdot \overline{C}p_j + \nu_k \cdot \Delta H_k^0 \cdot r \cdot V$

BALANCE DE MATERIA: $F_j - F_{j_0} + \frac{dN_j}{dt} = \nu_j \cdot r \cdot V$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \xrightarrow{A_3} A_2$

$\rho_j = 800$ kg/m^3

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = -58000$ kJ/kmol A_1

$\overline{C}_{p_j} = 2.1$ kJ/kg·K

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 = 1.2 \cdot 10^{-4} \cdot c_1 \quad \left(\frac{kmol}{m^3 \cdot s}\right)$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 300$ K	$T = 310$ K
Sólo A_3	$c'_{10} = 8$ kmol A_1/m^3
$Q_{v0} = f(t)$	$V_0 = 1.5$ m^3
	$N'_{10} = 8 \cdot 1.5 = 12$ kmol A_1
	$V = f(t)$
	a) $Q_{v0} = ?$ $(t = 2h)$
	b) $V = ?$ $(t = 2h)$

RESULTADOS

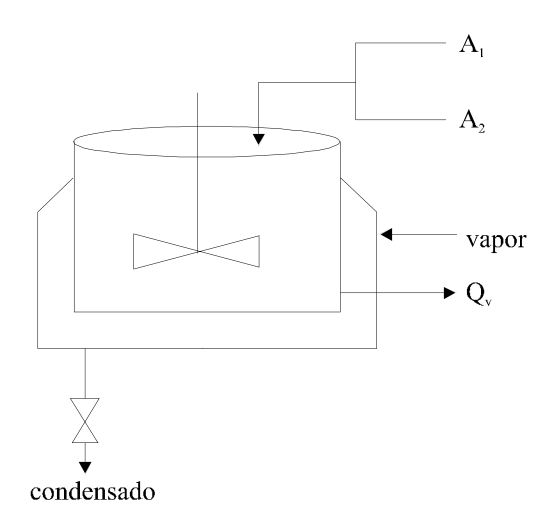
SOLUCIÓN: ***a)*** **$Q_{v0}(t) = 0.002$ m^3/s**

b) **$V = 25.5$ m^3**

Problema 1.03. En un RCTA se desarrolla una reacción química elemental irreversible en fase líquida, según el esquema:

$$A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$$

Dado que la reacción es endotérmica, el reactor va provisto de una camisa de vapor de calefacción (figura adjunta). A partir de los datos que se detallan a continuación, calcular la temperatura de la mezcla reactante (temperatura de reacción) si el citado reactor opera en régimen estacionario, alcanzando un grado de conversión del 95 %.



Datos y notas

Volumen del reactor: 0.50 m^3
Superficie efectiva de transmisión de calor: 0.90 m^2
Temperatura de condensación del vapor de calefacción: 458 K
Coeficiente global de transmisión de calor desde el vapor calefactor a la mezcla reactante: 852 $J/m^2 \cdot s \cdot K$.
Potencia del agitador: 0.25 Hp
Calor de reacción: 46500 kJ/kmol de A_1 (supóngase independiente de la temperatura).

	A_1	A_2	A_3
Caudal de alimentación (mol/h)	100	100	0
Temperatura de alimento (K)	300	300	---
Calor específico (kJ/mol·K) (Independiente de la T)	213	184	200
Peso molecular	128	94	---
Densidad (kg/m^3)	1009	1076	1041

El volumen de reacción permanece constante lógicamente durante toda la operación (régimen estacionario) y es igual al volumen del reactor.

REACTOR

TIPO: RCTA, EE
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 \text{-} J \cdot X = Q + W$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$

$M_1 = 128$ kg/kmol ; $M_2 = 94$ kg/kmol

$\rho_1 = 1009\ kg/m^3$; $\rho_2 = 1076\ kg/m^3$; $\rho_3 = 1041\ kg/m^3$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = 46500$ kJ/kmol

$\overline{C}_{p_1} = 213$ kJ/kmol·K ; $\overline{C}_{p_2} = 184$ kJ/kmol·K ; $\overline{C}_{p_3} = 200$ kJ/kmol·K

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR Y SALIDA
F_{10} = 0.1 Kmol/h	V = 0.5 m^3
F_{20} = 0.1 Kmol/h	X = 0.95
T_0 = 300 K	T = ?

INTERCAMBIADOR: A = 0.90 m^2
T_f = 458 K
U = 852 J/m^2·s·K = 3067.2 kJ/m^2·h·K

AGITADOR: P = 0.25 CV = 661.95 kJ/h

RESULTADOS

SOLUCIÓN: *a*) T = 454.4 K (considerando W)
***b*) T = 454.2 K (sin considerar W)**

Problema 1.04. La descomposición de la fosfamina tiene lugar a temperaturas elevadas con arreglo al esquema siguiente:

$$4PH_3(g) \rightarrow P_4(g) + 6H_2(g)$$

La reacción es endotérmica e irreversible, ajustándose bien a una cinética de primer orden, según la ecuación $-\Re_{PH_3} = k \cdot c_{PH_3}$.

Si se parte de fosfamina pura, a 945 K, y la reacción se desarrolla adiabáticamente, mediante un balance energético, puede determinarse la variación de la temperatura con el grado de conversión. Dicha variación se detalla en la tabla siguiente junto con los valores de la constante de velocidad referida a la desaparición de fosfamina correspondientes a las diferentes temperaturas:

X	0.00	0.10	0.20	0.25	0.30
T (K)	945	885	826	797	768
k (s^{-1})	37.2	1.42	$3.65\cdot10^{-2}$	$3\cdot10^{-3}$	$5.83\cdot10^{-4}$

¿Qué tamaño de reactor tubular se requerirá para alcanzar una conversión del 30 %, si el reactor opera a la presión atmosférica, y el alimento se introduce (en fase gaseosa) con un caudal másico de 22.7 kg de fosfamina pura/h, a una temperatura de 945 K?

REACTOR

TIPO: RFP, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS, P = 1 atm = cte

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot dX$

BALANCE DE MATERIA: $dV = F_{k_0} \dfrac{dX}{(-V_k) \cdot r}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $4PH_3\,(g) \rightarrow P_4\,(g) + 6H_2\,(g) \;;\; 4A_1 \rightarrow A_2 + 6A_3$

$$c_1 = c_{10} \frac{(1-X)}{\frac{P_0}{P}\frac{T}{T_0}(1+\varepsilon_k X)} = \frac{945 \cdot 12.9 \cdot 10^{-3}}{T} \cdot \frac{(1-X)}{(1+0.75X)}$$

$$\varepsilon_k = x_{k_0} \frac{\sum V_j}{(-V_k)} = 1 \cdot \frac{6+1-4}{4} = 0.75$$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

CINÉTICA: $\ln k = 52.51 - 46204 \cdot \dfrac{1}{T} \;;\; k = 6.41 \cdot 10^{22} \cdot \exp\left[-\dfrac{46204}{T}\right] (s^{-1}) \;;\; r^2 = 0.999$

$$\mathfrak{R}_1 = V_1 \cdot r \rightarrow r = \frac{\mathfrak{R}_1}{V_1} = \frac{1}{4} \cdot k \cdot c_1 = \frac{1}{4} \cdot 6.41 \cdot 10^{22} \cdot \exp\left[-\frac{46204}{T}\right] \cdot \frac{945 \cdot 12.9 \cdot 10^{-3}}{T} \cdot \frac{(1-X)}{(1+0.75 \cdot X)}$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	SALIDA
$T_0 = 945$ K	$X = 0.3$
$x_{10} = 1$	$V = ?$
$M_1 = 34$ kg/kmol	
$F_{10} = 22.7 \left(\dfrac{kg\ A_1}{h}\right) \cdot \dfrac{1}{34} \cdot \dfrac{1}{3600} = 1.86 \cdot 10^{-4}$ kmol/s	
$c_{10} = \dfrac{P_{10}}{RT_0} = \dfrac{P_0 \cdot x_{10}}{RT_0} = \dfrac{1 \cdot 1}{0.082 \cdot 945} = 12.9 \cdot 10^{-3} \dfrac{kmol}{m^3}$	

RESULTADOS

Tabla 1.2. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

T(K)	k (s^{-1})	ln k	1/T (K^{-1})	X
945	37.200000	3.616309	0.0010582	0.00
885	1.420000	0.350657	0.0011299	0.10
826	0.036500	-3.310443	0.0012107	0.20
797	0.003000	-5.809143	0.0012547	0.25
768	0.000583	-7.447323	0.0013021	0.30

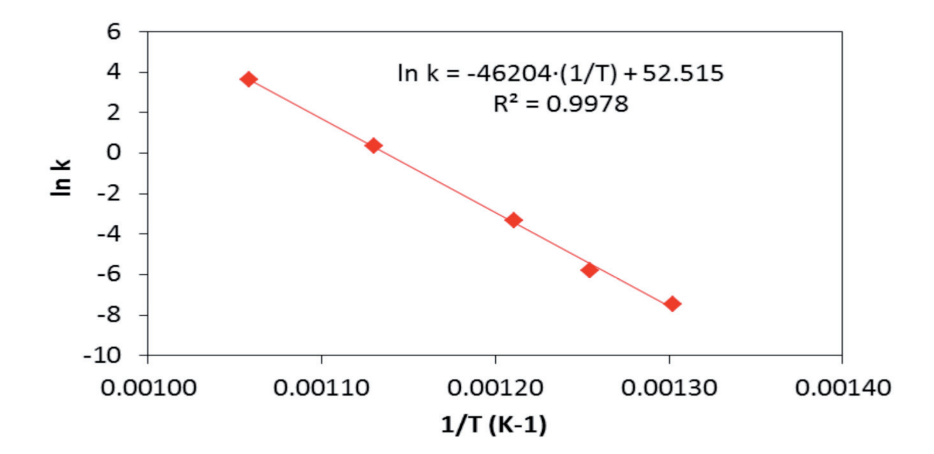


Figura 1.2. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

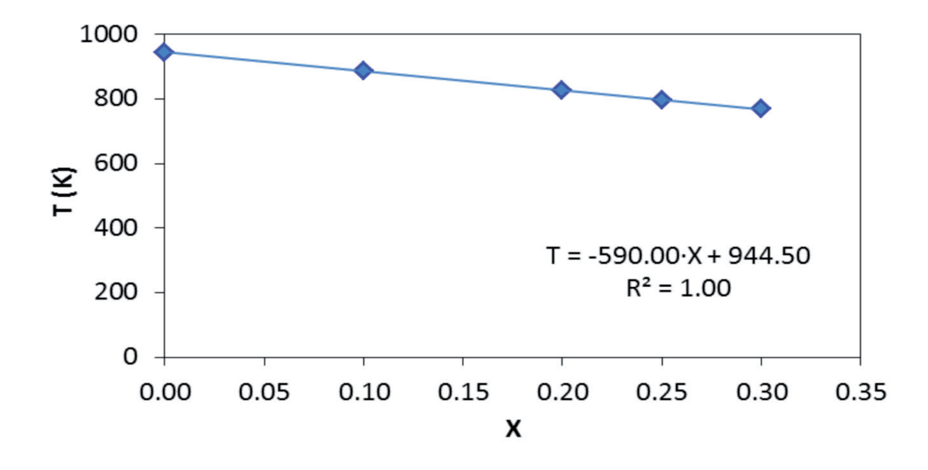


Figura 1.3. Ajuste de la variación de la temperatura con el grado de conversión

SOLUCIÓN: V = 1 m^3

Problema 1.05. Las reacciones de craqueo de hidrocarburos se suelen llevar a cabo en reactores tipo RFP. Dado que se trata de reacciones endotérmicas, se utilizan diferentes técnicas para suministrar al sistema el flujo de calor necesario. La temperatura máxima a la entrada está determinada por problemas con los materiales de construcción o con la aparición de reacciones no deseadas como la coquización. Si se ha fijado la temperatura a la entrada del RFP (T_0) y la temperatura a lo largo del reactor puede disminuir, a pesar de la posible aportación energética, este efecto, junto con la disminución de la concentración de los reactivos por la reacción química, contribuirá a la disminución de la velocidad de ésta. Una forma de reducir este efecto consiste en utilizar una elevada proporción de inerte en la corriente alimento.

Considérese una reacción de craqueo de la forma:

$$A_1 \rightarrow \text{productos}$$

cuya cinética de primer orden responde a la ecuación:

$$r = 10^{14} \cdot \exp\left(\frac{-24000}{T}\right) \cdot c_1 \quad (\text{g/s} \cdot \text{m}^3)$$

donde T va en K y c_1 en g/m^3.

Esta reacción se desarrolla en un RFP adiabático con un tiempo espacial de 0.3 s. Si la concentración en la corriente de entrada es de 132 g/m^3 de A_1 y 270 g/m^3 de inerte, calcular la concentración de A_1 y la temperatura de la corriente de salida. Repetir el cálculo anterior para una corriente de entrada cuyas concentraciones son 270 g/m^3 de A_1 y 132 g/m^3 de inerte e interpretar los resultados obtenidos.

Datos y notas

Calor específico de A_1 y de sus productos: 0.4 cal/g·K
Calor específico del inerte: 0.5 cal/g·K
La densidad del sistema se puede considerar constante en primera aproximación. Para el valor de esta densidad se tomará la de entrada, que se calculará como la suma de las densidades (composiciones) de los dos componentes.
$\Delta H^0_1 = 203$ cal/g
$T_0 = 798$K

REACTOR

TIPO: RFP, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot dX$

BALANCE DE MATERIA: $dV = F_{k_0} \dfrac{dX}{(-V_k) \cdot r}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \xrightarrow{A_3} A_2$

$$\rho = cte = 132 \text{ g/m}^3 + 270 \text{ g/m}^3 = 402 \text{ g/m}^3$$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_1^0 = 203 \text{ cal/g}$$

$$\overline{C}_{p_1} = \overline{C}_{p_2} = 0.4 \text{ cal/g·K} \quad ; \quad \overline{C}_{p_3} = 0.5 \text{ cal/g·K}$$

CINÉTICA: $r = 10^{14} \cdot \exp\left[-\dfrac{24000}{T}\right] \cdot c_1 \quad (\text{g/s} \cdot \text{m}^3)$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 798$ K	$\tau = 0.3$ s
$c_{10} = 132$ g/m^3, $c_{30} = 270$ g/m^3 a)	a) $c_1 = ?$, $T = ?$
$c_{10} = 270$ g/m^3, $c_{30} = 132$ g/m^3 b)	b) $c_1 = ?$, $T = ?$

cc A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7

RESULTADOS

→ X = f(τ)

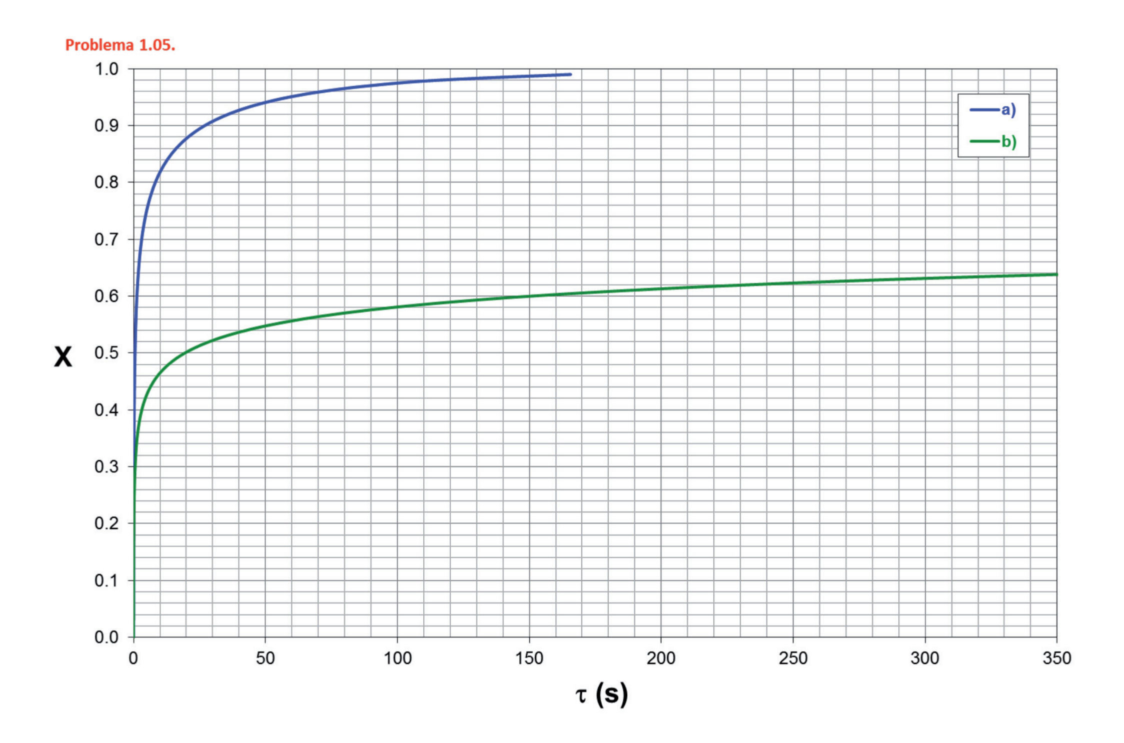


Figura 1.4. Evolución del grado de conversión con el tiempo espacial: apartados (*a*) y (*b*), en azul y verde, respectivamente

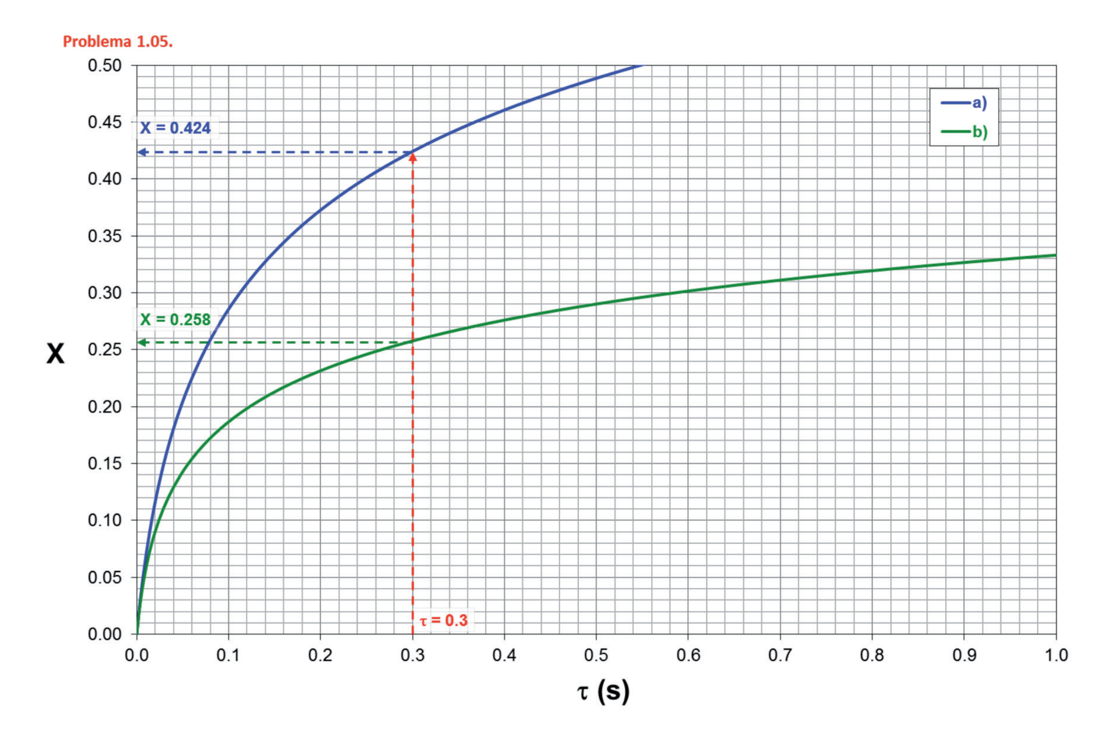


Figura 1.5. Determinación del grado de conversión correspondiente al tiempo espacial de 0.3 s: apartados (*a*) y (*b*), en azul y verde, respectivamente

→ T = f(τ)

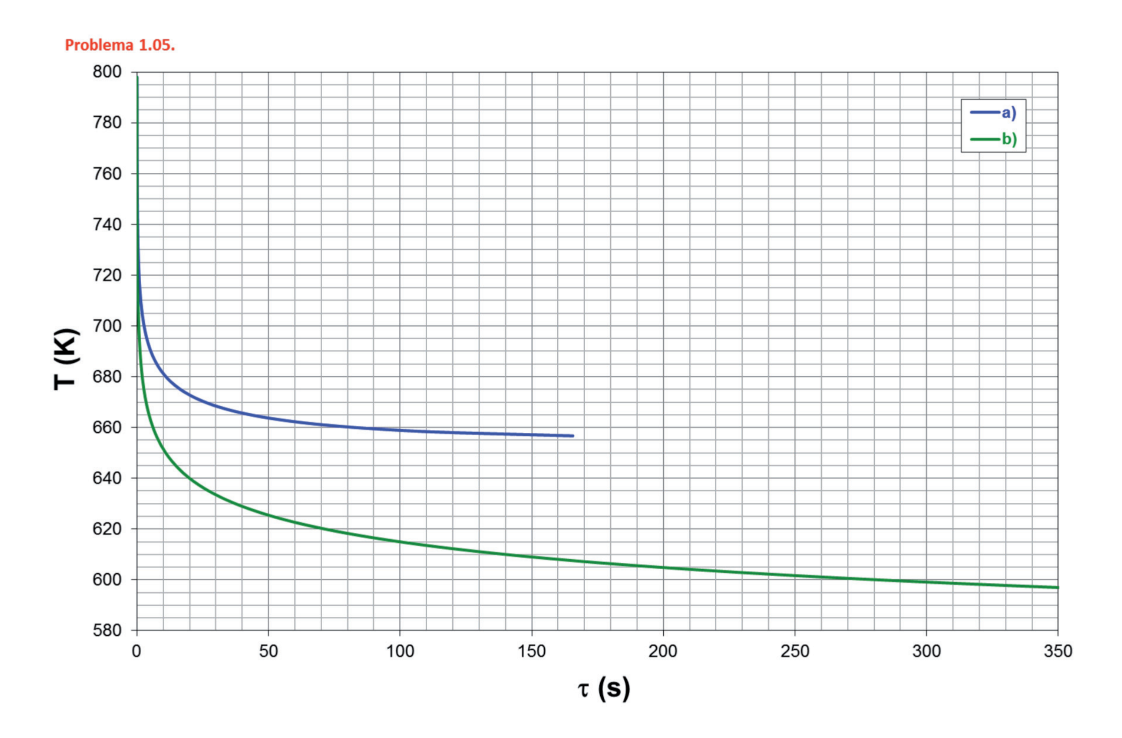


Figura 1.6. Evolución de la temperatura de reacción con el tiempo espacial: apartados (*a*) y (*b*), en azul y verde, respectivamente

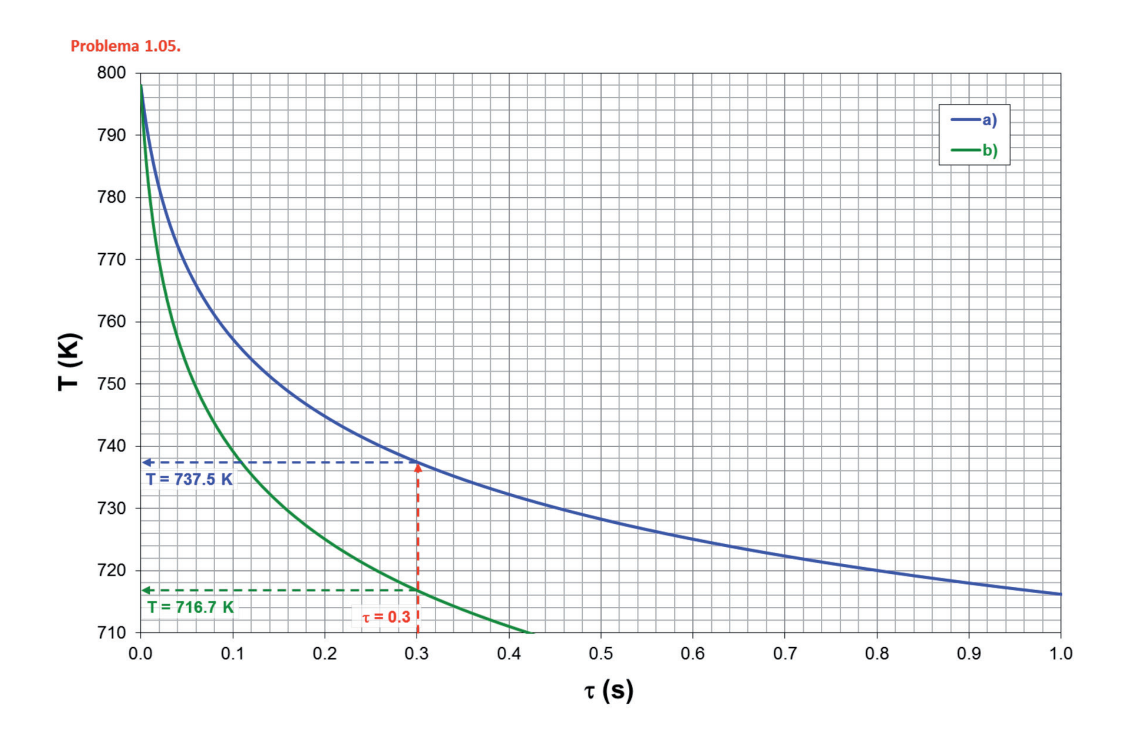


Figura 1.7. Determinación de la temperatura de reacción correspondiente al tiempo espacial de 0.3 s: apartados (*a*) y (*b*), en azul y verde, respectivamente

SOLUCIÓN: ***a*) c_1 = 76.0 g/m³ y T = 737.5 K (X = 0.424)**

***b*) c_1 = 200.3 g/m³ y T = 716.7 K (X = 0.258)**

Problema 1.06. En un RDTA se desarrolla la reacción elemental, irreversible, en fase líquida:

$$A_1 + A_2 \rightarrow A_3 + A_4$$

El alimento consiste en una mezcla equimolecular de A_1 y A_2 puros, a 100 °C.

a) Deducir una expresión que relacione el grado de conversión con el tiempo de reacción, cuando el RDTA opera de forma isoterma a la temperatura del alimento.
b) Deducir una expresión que relacione la temperatura con el grado de conversión, cuando el RDTA opera de forma adiabática.
c) Determinar la variación del grado de conversión con el tiempo de reacción cuando el RDTA opera de forma adiabática. ¿Se podrán utilizar dispositivos de control que tengan accesorios situados dentro del reactor que se deterioren a temperaturas superiores a 250 °C?
d) Si el reactor funciona de forma isoterma, ¿a qué temperatura ha de operar para conseguir una conversión de 0.95 en tres horas? ¿Existiría en este caso algún problema con los accesorios de los elementos de control mencionados en el apartado anterior?

Datos y notas

$\Delta H^0_1 = -10^5$ kJ/kmol de A_1
$k = 1.5 \cdot 10^{11} \cdot \exp(-14000/T)$ (m^3/kmol·s)
Calor específico del alimento: 3.6 kJ/K·kg (constante para todo el periodo de reacción)
Densidad del alimento: 1100 kg/m^3 (constante para todo el periodo de reacción)
$M_1 = 100$ kg/kmol
$M_2 = 80$ kg/kmol

REACTOR

TIPO: RDTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot dX$

BALANCE DE MATERIA: $dt = c_{k_0} \dfrac{dX}{(-V_k) \cdot r}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow A_3 + A_4$

$\rho_{mezcla} = 1100\ kg/m^3 = cte$

$M_1 = 100\ kg/kmol$ y $M_2 = 80\ kg/kmol$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = -10^5\ kJ/kmol$

$\overline{C}_{p_{mezcla}} = 3.6\ kJ/kg \cdot K$

CINÉTICA:

$$k = 1.5 \cdot 10^{11} \cdot \exp\left[-\frac{14000}{T}\right] \quad (m^3/kmol \cdot s)$$

$$\left.\begin{array}{l} r = k \cdot c_1 \cdot c_2 \\ c_1 = c_2 = c_{10} \cdot (1-X) \end{array}\right\} r = k \cdot c_{10}^2 \cdot (1-X)^2$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 373K$ $x_{10} = x_{20} = 0.5$	*a*) X = f(t) (isotermo) *b*) T = f(X) (adiabático) *c*) X = f(t) (adiabático); dispositivos $T_{lim} = 523$ K *d*) isotermo: X = 0.95 y t = 3 h → T = ? ¿problemas T_{lim} dispositivos?

RESULTADOS

a) $X = \dfrac{t}{(t + 21800.4)}$

b) T = 373+154.3·X

c) X = f(t)

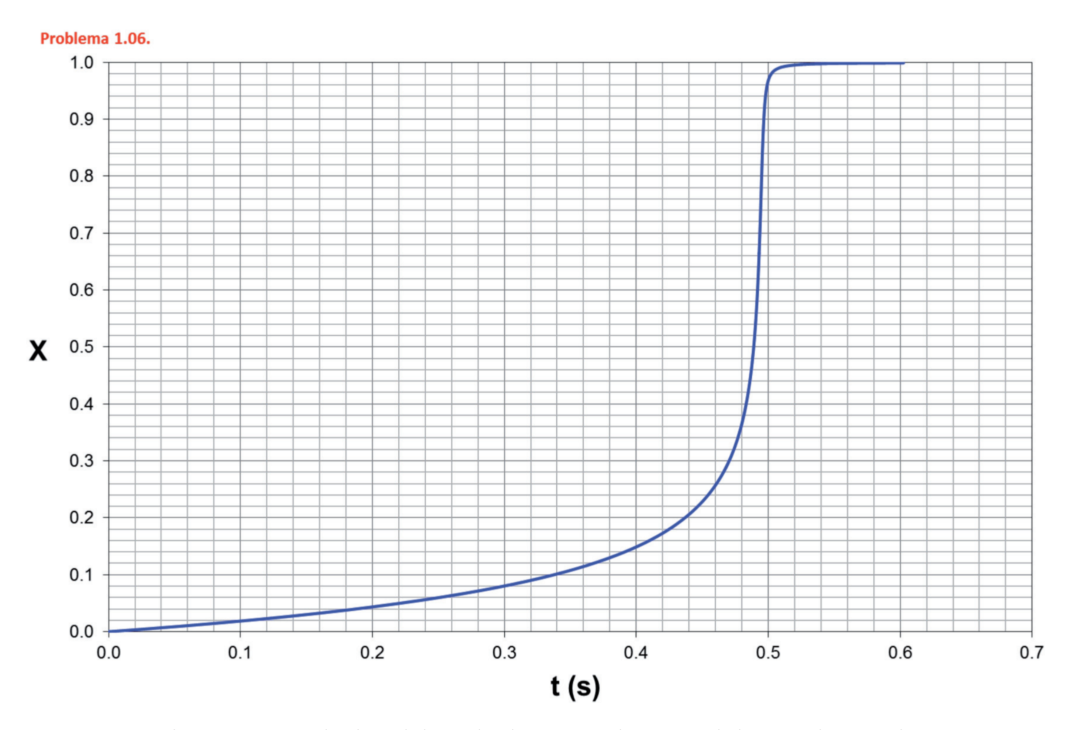
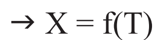


Figura 1.8. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción



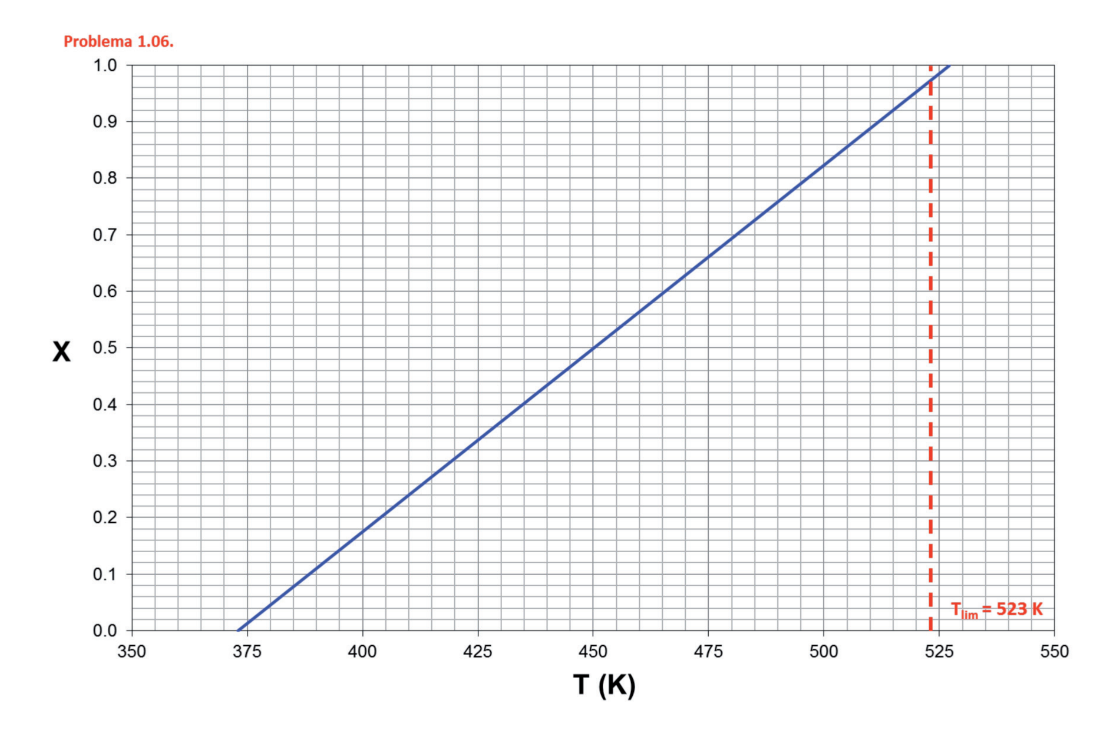


Figura 1.9. Evolución del grado de conversión con la temperatura de reacción: T_{lim}

Cuando X → 1, $T > T_{lim}$, por lo que sí que habría problemas con los dispositivos de control.

d) T = 413 K, no hay problemas con los dispositivos de control

SOLUCIÓN: *a*) $X = t/(t+21800.4)$

b) $T = 373+154.3 \cdot X$

c) Cuando $X \rightarrow 1$, $T > T_{lim}$, sí que habría problemas con los dispositivos de control

(ver Figura 1.9.)

c) T = 413 K, no hay problemas con los dispositivos de control

Problema 1.07. Se desea diseñar una planta piloto para la producción de A_3, según la siguiente reacción irreversible en fase gas:

$$A_1 + A_2 \rightarrow A_3 + A_4$$

El alimento al reactor consiste en una mezcla de 4 moles de A_2 por cada mol de A_1, a 200 °C. El caudal molar total del alimento es $0.17 \cdot 10^{-3}$ kmol/h. El reactor está constituido por un tubo de 5 pulgadas de diámetro interno y perfectamente aislado del exterior para que su comportamiento se pueda considerar adiabático. Teniendo en cuenta que el producto A_3 se descompone a una temperatura superior a los 546K, calcular la máxima posible longitud del reactor para evitar la descomposición de A_3.

Datos y notas

$\Delta H°_k = -26800$ kcal/kmol

$r = 206 \cdot 10^6 \cdot \exp\left(\frac{-14233}{T}\right) \cdot p_1 \cdot p_2$, en la que si las presiones parciales se expresan en atm la velocidad viene en kmol/m^3·h.

Los calores específicos son 8.6, 25.3, 28 y 7.2 kcal/kmol·K para A_1, A_2, A_3 y A_4 respectivamente.

La presión total es constante e igual a 2 atm.

REACTOR

TIPO: RFP, ADIABÁTICO

Nº REACCIONES: 1

FASE: GAS, P = 2 atm = cte

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot dX$

BALANCE DE MATERIA: $dV = F_{k_0} \frac{dX}{(-V_k) \cdot r}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow A_3 + A_4$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H^\circ_k = -26800$ kcal/kmol

$\bar{C}_{p_1} = 8.6 \;;\; \bar{C}_{p_2} = 25.3 \;;\; \bar{C}_{p_3} = 28 \;;\; \bar{C}_{p_4} = 7.2 \quad$ (kcal/kmol·K)

CINÉTICA: $r = 206 \cdot 10^6 \cdot \exp\left[-\frac{14233}{T}\right] \cdot p_1 \cdot p_2 \quad (\text{kmol/m}^3 \cdot \text{h})$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$x_{10} = \frac{1}{4+1} = 0.2$	$T_{lim} = 546K$
$x_{20} = \frac{4}{4+1} = 0.8$	D = 5" ≡ 0.127 m
$F_{t0} = 0.17 \cdot 10^{-3}$ kmol/h	L = ?
$T_0 = 200$ °C ≡ 473K	

RESULTADOS

SOLUCIÓN: L = 17.65 m

Problema 1.08. La hidrólisis de soluciones acuosas diluidas de anhídrido acético es una reacción irreversible y de segundo orden total (primer orden parcial con respecto a cada uno de los reactivos). El esquema de reacción es:

$$(CH_3CO)_2O(\ell) + H_2O(\ell) \rightarrow 2CH_3COOH(\ell)$$

Esta reacción se va a llevar a cabo en un RDTA que se va a cargar inicialmente con 200 litros de disolución acuosa de anhídrido acético, con una concentración de 0.216 kmol/m^3, y a 15 °C.

a) Si el RDTA es isotermo (utilizando el sistema refrigerante adecuado), calcular el tiempo de reacción necesario para alcanzar una conversión del 70 %.

b) Si el RDTA está perfectamente aislado y su comportamiento puede considerarse adiabático, calcular el tiempo de reacción necesario para alcanzar una conversión del 70 %.

Datos y notas

T(K)	283	288	298	313
r (kmol/min · m^3)	0.0567 · c	0.0806 · c	0.1580 · c	0.3800 · c

siendo *c* la concentración de anhídrido acético, en kmol/m^3.

Para la mezcla de reacción C_p = 3.77 kJ/kg · K
Para la mezcla de reacción ρ = 1050 kg/m^3
$\Delta H°_k$ = –209300 kJ/kmol

REACTOR

TIPO: RDTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot dX$

BALANCE DE MATERIA: $dt = c_{k_0} \dfrac{dX}{(-V_k) \cdot r}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $(CH_3CO)_2O\ (l) + H_2O\ (l) \rightarrow 2CH_3COOH\ (l)$

$A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$

$\rho_{mezcla} = 1050\ kg/m^3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H°_k = -209300\ kJ/kmol$

$\overline{C}p_{mezcla} = 3.77\ kJ/kg \cdot K$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 \cdot c_2 = (k \cdot c_2) \cdot c_1$

$$r = 2.416 \cdot 10^7 \cdot \exp\left[\frac{-5621.08}{T}\right] \cdot c_1 \quad ; \quad R^2 = 0.9998$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$c_{10} = 0.216$ kmol/m^3	*a*) t = ? (isotermo, X=0.7)
$T_0 = 15$ °C ≡ 288K	*b*) t = ? (adiabático, X=0.7)
$V_0 = 200$ l ≡ 0.2 m^3	

RESULTADOS

Tabla 1.3. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

T (K)	1/T (K^{-1})	$k \cdot c_2$ (kmol/min·m^3)	$\ln(k \cdot c_2)$
283	0.00353	0.0567	-2.86998107
288	0.00347	0.0806	-2.51825663
298	0.00336	0.1580	-1.84516025
313	0.00319	0.3800	-0.96758403

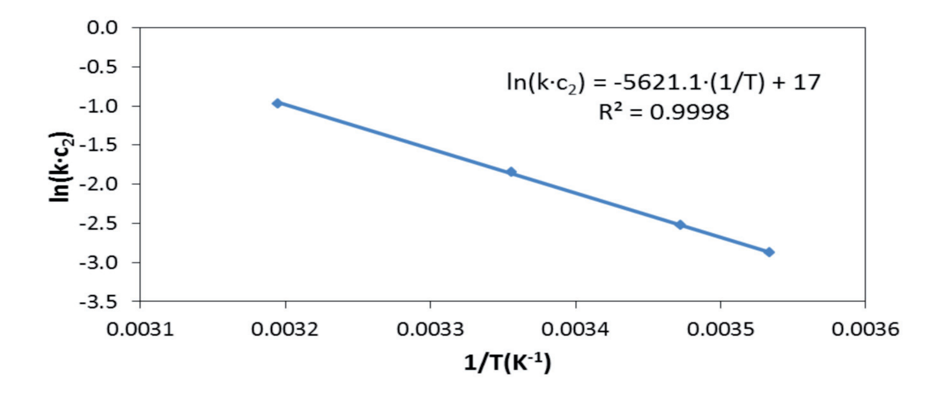


Figura 1.10. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura: $\ln(k \cdot c_2) = f(1/T)$

SOLUCIÓN: *a*) t = 15 min
_b_) t = 11 min

CAPÍTULO 2

Reactor continuo de tanque agitado (RCTA) con intercambio de calor y adiabático

Problema 2.01. En un proceso continuo se hidroliza una solución acuosa de un éster de ácido orgánico monobásico por reacción acuosa de NaOH en un RCTA que contiene 6 m^3 de líquido. En el interior del reactor hay un serpentín sumergido que mantiene la temperatura de reacción a 25°C. A partir de los datos que se dan a continuación estimar el área de transmisión de calor necesaria si el agua de enfriamiento entra en el serpentín a 15 °C y lo abandona a 20 °C. Despréciense las pérdidas de calor desde el reactor a los alrededores.

Datos y notas

Solución de éster: caudal: 0.025 m^3/s; temperatura: 25 °C; concentración: 1 $kmol/m^3$
Solución de álcali: caudal: 0.010 m^3/s; temperatura: 20 °C; concentración: 5 $kmol/m^3$
Constante de velocidad de reacción a 25 °C: 0.11 $m^3/kmol \cdot s$
Calor de reacción: $-1.46 \cdot 10^7$ J/kmol
Coeficiente global de transmisión de calor: 2280 $W/m^2 \cdot K$

REACTOR

TIPO: RCTA + I.C.
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q = \dfrac{Q^*}{F_{k_0} \cdot \sum \theta_j \cdot \overline{C}_{p_j}}$, siendo $Q^* = U \cdot A \cdot (T_f - T)_{ml}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $R-COOH + NaOH \xrightarrow{H_2O} R\text{-}COONa + H_2O$

$A_1 + A_2 \xrightarrow{A_5} A_3 + A_4$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = -1.46 \cdot 10^7 \text{ J/kmol} \equiv -146000 \text{ kJ/kmol}$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 \cdot c_2 = k \cdot c_{10} \cdot (1-X) \cdot (c_{20} - c_{10} \cdot X)$

$k = 0.11 \text{ m}^3/\text{kmol} \cdot \text{s}$

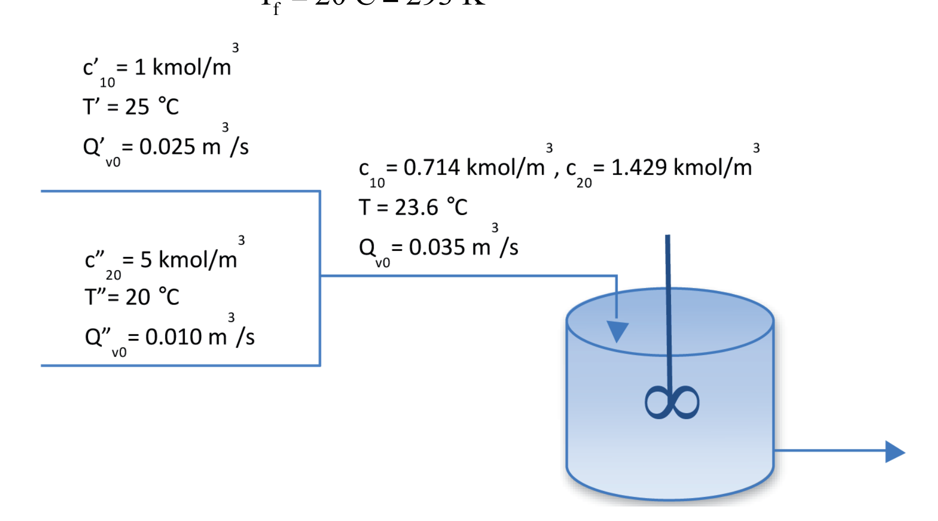
DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$Q_{v0} = 0.025 + 0.010 = 0.035 \text{ m}^3/\text{s}$	$T = 25\ °C = 298K$
$T_0 = \dfrac{25 \cdot 0.025 + 20 \cdot 0.010}{0.025 + 0.010} = 23.6\ °C = 296.6K$	$V = 6 \text{ m}^3$
$c_{10} = \dfrac{1 \cdot 0.025}{0.035} = 0.714 \text{ kmol/m}^3$	$A = ?$
$c_{20} = \dfrac{5 \cdot 0.010}{0.035} = 1.429 \text{ kmol/m}^3$	

INTERCAMBIADOR: $U = 2280 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K} \equiv 2.28 \text{ kJ/s} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}$

$T_{f_0} = 15°C \equiv 288 \text{ K}$

$T_f = 20°C \equiv 293 \text{ K}$



RESULTADOS

SOLUCIÓN: A = 8.8 m²

Problema 2.02. En un RCTA se desarrolla la reacción endotérmica irreversible en fase líquida $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$. El reactor se calienta mediante una camisa de vapor a la presión adecuada. El alimento consiste en una mezcla de A_1 y A_2, en la que la concentración de ambos componentes es la misma e igual a 2 kmol/m^3, que se introduce en el reactor a la temperatura de 300K, con un caudal volumétrico de $30 \cdot 10^{-3}$ m^3/min. El volumen total de reacción es de 1.2 m^3 y se desea obtener un grado de conversión de 0.6 de A_1.

a) Encontrar la temperatura de estado estacionario a que debe funcionar el reactor para alcanzar el grado de conversión deseado.
b) Calcular la temperatura a la que debe condensar el vapor de calefacción.
c) Determinar los kg de vapor de calefacción que condensarán por hora.

Datos y notas

La velocidad de reacción se puede expresar como $r = k \cdot c_1 \cdot c_2$ en la que k viene expresada en m^3/kmol·h, valiendo 1.035 para una temperatura de 300 K, varía con la temperatura según la ley de Arrhenius siendo su energía de activación de 10000 kJ/kmol.
El calor de reacción a 300K vale 41860 kJ/kmol de A_1 y los calores específicos molares medios, para el intervalo de temperaturas del problema, puede considerarse que tienen los valores siguientes:

$$\bar{C}_{p1} = \bar{C}_{p2} = 83.7 \text{ kJ / kmol} \cdot \text{K} \qquad \bar{C}_{p3} = 167.4 \text{ kJ / kmol} \cdot \text{K}$$

El área de la superficie de transmisión de calor es de 6 m^2 y el coeficiente global de transmisión de calor desde el fluido calefactor a la mezcla reactante vale 15070 kJ/h·m^2·K. El calor latente de vaporización del agua (en kcal/kg) en función de la temperatura (en grados Celsius) se puede expresar como $H_v = 606.5 - 0.695 \cdot T$.

REACTOR

TIPO: RCTA + I.C.
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q = \dfrac{Q^*}{F_{k_0} \cdot \sum \theta_j \cdot \bar{C}_{p_j}}$, siendo $Q^* = U \cdot A \cdot (T_{f_0} - T) = m_f \cdot H_v$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = 41860 \text{ kJ/kmol } A_1$$

$$\overline{C}_{p_1} = \overline{C}_{p_2} = 83.7 \text{ kJ/kmol·K} \;\; y \;\; \overline{C}_{p_3} = 167.4 \text{ kJ/kmol·K}$$

CINÉTICA:

$$k = A \cdot \exp\left[\frac{-10000}{8.32 \cdot T}\right] \; ; \; \left\{ \begin{matrix} T = 300K \\ k = 1.035 \text{ m}^3/\text{kmol} \cdot \text{h} \end{matrix} \right\} \rightarrow k = 56.87 \cdot \exp\left[\frac{-1201.92}{T}\right]$$

$$r = k \cdot c_1 \cdot c_2 = 56.87 \cdot \exp\left[\frac{-1201.92}{T}\right] \cdot c_{10}^2 \cdot (1 - X)^2$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$c_{10} = c_{20} = 2$ kmol/m^3	$V = 1.2$ m^3
$T_0 = 300$K	$X = 0.6$
$Q_{v0} = 30 \cdot 10^{-3}$ m^3/min = 1.8 m^3/h	*a)* T_{EE}, *b)* T_{f0}, *c)* m_f = ?

INTERCAMBIADOR: $U = 15070 \text{ kJ/h} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}$

$$A = 6 \text{ m}^2$$

$$\underbrace{H_v = 606.5 - 0.795 \cdot T_{f_0} \left(\frac{\text{kcal}}{\text{kg}}\right)}_{\text{con T (°C)}} \rightarrow \underbrace{H_v = 2535.17 - 2.9051 \cdot (T_{f_0} \text{-}273) \left(\frac{\text{kJ}}{\text{kg}}\right)}_{\text{con T (K)}}$$

RESULTADOS

SOLUCIÓN: ***a)*** $T_{EE} = 400$ **K**

b) $T_{f0} = 402$ **K**

c) $m_f = 69.7$ **kg/h**

Problema 2.03. En un RCTA con un volumen útil de 10^{-3} m^3 se desarrolla la reacción irreversible en fase líquida y de segundo orden $A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$. El alimento se introduce con un caudal de $6 \cdot 10^{-3}$ m^3/h y está constituido por una mezcla equimolecular de A_1 y A_2, en la que dichas especies están presentes con una concentración de 6.67 kmol/m^3. Si la temperatura del alimento es de 42.4 °C y el reactor está rodeado por una camisa de refrigeración que se mantiene a una temperatura prácticamente uniforme e igual a 87 °C:

a) Encontrar los posibles estados estacionarios indicando su estabilidad o inestabilidad. Resolver utilizando los métodos de Levenspiel y Aris, y comparar los resultados obtenidos.
b) Estimar la temperatura de encendido de la reacción en el supuesto que la temperatura de entrada del alimento se fuera aumentando lentamente.

Datos y notas

La constante de velocidad de reacción se puede estimar como:

$$k = 5.5 \cdot 10^7 \cdot \exp\left(\frac{-10000}{T}\right) \quad m^3/kmol \cdot s$$

El calor de reacción vale –80 kJ/mol de A_1 y el calor específico medio de la mezcla alimento es $2.72 \cdot 10^3$ kJ/$m^3 \cdot$ K.
El área de la superficie de transmisión de calor es de $2.5 \cdot 10^{-2}$ m^2 y el coeficiente global de transmisión de calor vale 69.8 W/$m^2 \cdot$ K.

REACTOR

TIPO: RCTA + I.C.
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = K \cdot (T_{f_0} - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = -80 \text{ kJ/mol } A_1 \equiv -80000 \text{ kJ/kmol } A_1$$

$$\overline{C}_{p_{medio}} = 2.72 \cdot 10^3 \text{ kJ/m}^3 \cdot K$$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 \cdot c_2 = 5.5 \cdot 10^7 \cdot \exp\left[\frac{-10^4}{T}\right] \cdot c_{10}^2 \cdot (1 - X)^2$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$Q_{v0} = 6 \cdot 10^{-3}$ m³/h º $1.67 \cdot 10^{-6}$ m³/s	$V = 10^{-3}$ m³
$c_{10} = c_{20} = 6.67$ kmol/m³	*a)* EE = ?
$T_0 = 42.4$ °C = 315.4K	*b)* $T_{Encendido} = ?$

INTERCAMBIADOR: $A = 2.5 \cdot 10^{-2}\ m^2$

$U = 69.8\ J/s \cdot m^2 \cdot K\ \equiv 69.8 \cdot\ 10^{-3}\ \ kJ/s \cdot m^2 \cdot K$

$T_{f_0} = 87^{\circ}C \equiv 360\ K$

RESULTADOS

→ Levenspiel

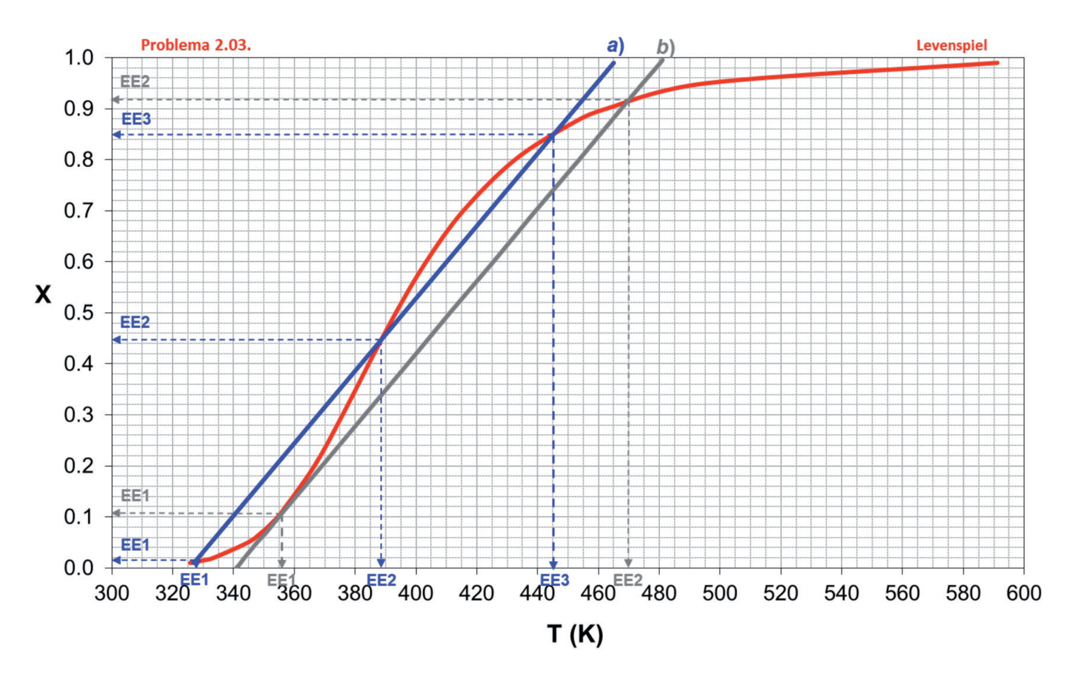


Figura 2.1. Resolución gráfica por Levenspiel: X = f(T)

Tabla 2.1. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Levenspiel

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	X	Estabilidad
	EE1	327.5	0.013	ESTABLE
a)	EE2	388.5	0.45	INESTABLE
	EE3	445.0	0.85	ESTABLE
b)	EE1	356.0	0.12	ENCENDIDO
	EE2	470.0	0.93	ESTABLE

El encendido se produce a un valor de $T_0 = 333.7$ K

→ Aris

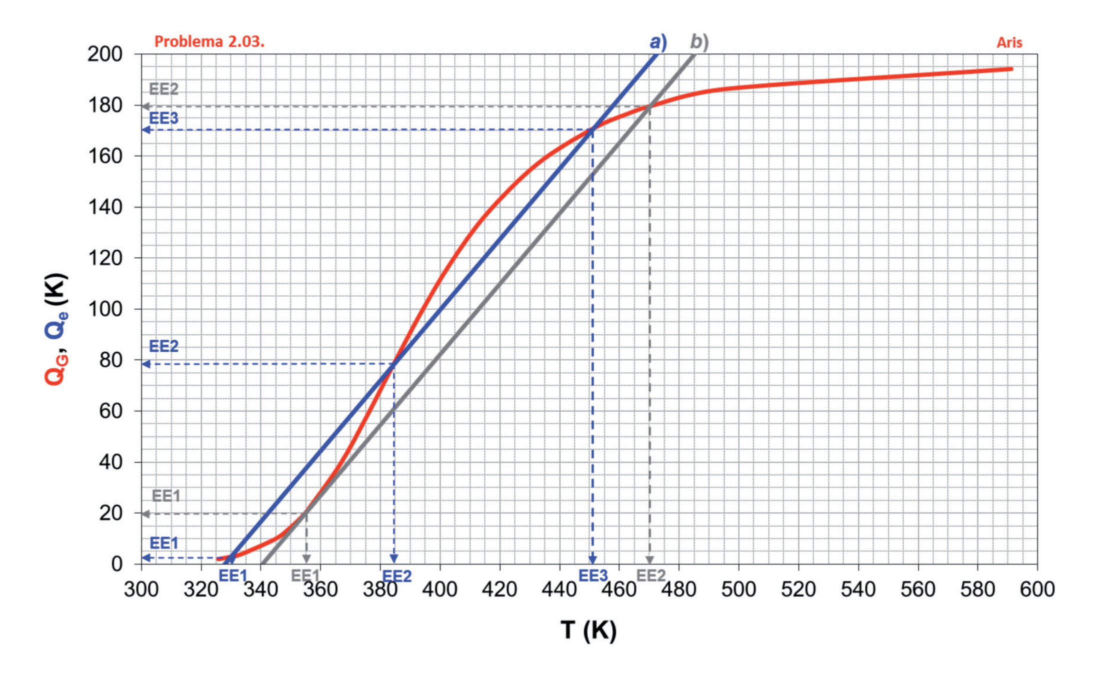


Figura 2.2. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$

Tabla 2.2. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
	EE1	330	3	0.015	ESTABLE
a)	EE2	385	80	0.40	INESTABLE
	EE3	451	170	0.87	ESTABLE
b)	EE1	355	20	0.10	ENCENDIDO
	EE2	471	180	0.92	ESTABLE

El encendido se produce a un valor de T_0 = 333.1 K

SOLUCIÓN:

	Levenspiel	**Aris**
a)	T_{EE1} = 327.5 K, X_{EE1} = 0.013	T_{EE1} = 330 K, X_{EE1} = 0.015
	T_{EE2} = 388.5 K, X_{EE2} = 0.45	T_{EE2} = 385 K, X_{EE2} = 0.40
	T_{EE3} = 445 K, X_{EE3} = 0.85	T_{EE3} = 451 K, X_{EE3} = 0.87
b)	T_0 = 333.7 K	T_0 = 333.1 K

Problema 2.04. Una mezcla que contiene dos reactantes A_1 y A_2 en igual concentración (6.67 kmol/m^3) se alimenta a un RCTA, adiabático, donde reacciona a 120 °C, con el esquema $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$. La reacción es irreversible, de segundo orden y su constante de velocidad vale $k = 5.5 \cdot 10^7 \cdot \exp\left(\frac{-10000}{T}\right) \quad m^3/kmol \cdot s$.

¿Cuál debe ser el caudal volumétrico y la temperatura de entrada del alimento si el reactor tiene un volumen de un litro y se desea alcanzar un grado de conversión de 0.5? Discutir la estabilidad del estado estacionario.

Datos y notas

El calor de reacción vale –80 kJ/mol de A_1 y el calor específico medio de la mezcla alimento es 2.72 · 10^3 kJ/m^3 · K.

REACTOR

TIPO: RCTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = 0$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$

$c_1 = c_2 = c_{10} \cdot (1 - X); \quad \rho_m = 2 \times 6.67$ kmol/m^3

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = -80$ kJ/mol $A_1 \equiv -80000$ kJ/kmol A_1

$\overline{C}_{p_{medio}} = 2.72 \cdot 10^3$ kJ/m$^3 \cdot$K

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 \cdot c_2 = 5.5 \cdot 10^7 \cdot \exp\left[\frac{-10^4}{T}\right] \cdot c_{10}^2 \cdot (1 - X)^2$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$c_{10} = c_{20} = 6.67$ kmol/m^3	$V = 10^{-3}$ m^3 $X = 0.5$ T = 120 °C ≡ 393K *a)* Q_{v0} = ?, *b)* T_0 = ?, *c)* EE = ?

RESULTADOS

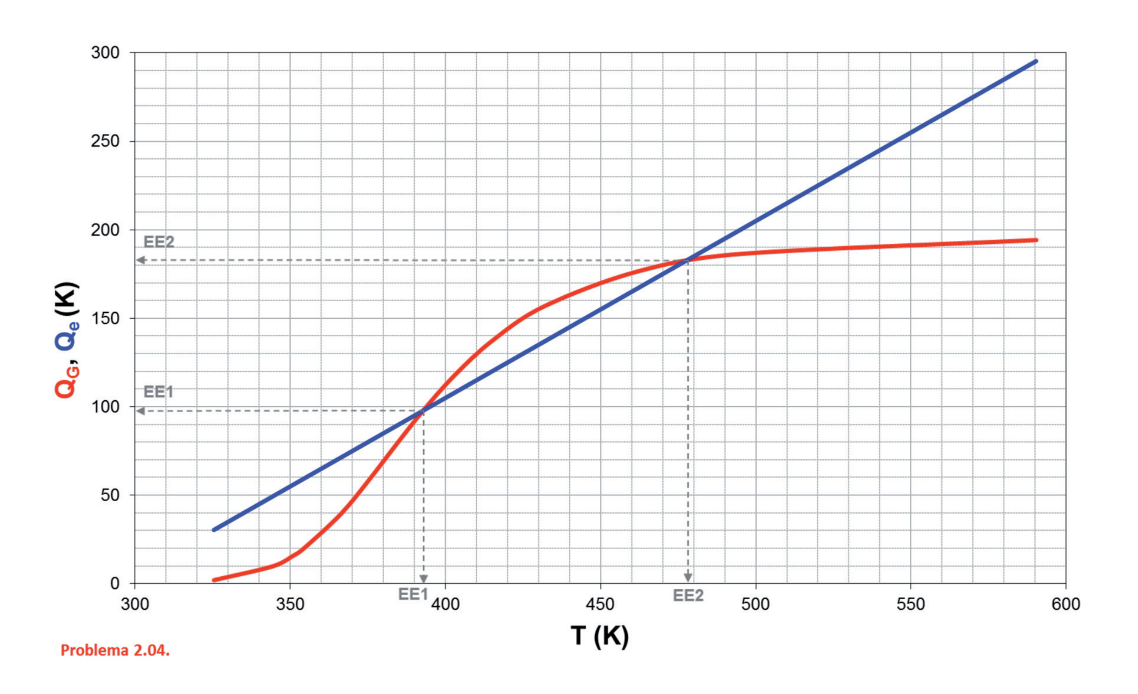


Figura 2.3. Resolución gráfica por Aris: Q_G = f(T) y Q_e = f(T)

Tabla 2.3. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
EE1	393	98.1	0.50	INESTABLE
EE2	477	182.4	0.93	ESTABLE

SOLUCIÓN: ***a)*** **Q_{v0} = 1.63·10^{-6} m^3/s**
b) **T_0 = 295 K**
c) **EE INESTABLE**

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

Problema 2.05. La reacción homogénea en fase líquida irreversible y de primer orden $A_1 \rightarrow \text{productos}$ se quiere desarrollar en un RCTA adiabático. La concentración de A_1 en el alimento es de 3 kmol/m^3 y se introduce a la temperatura de 298K y con un caudal volumétrico de $6\cdot10^{-5}$ m^3/s en un reactor de $18\cdot10^{-3}$ m^3. La densidad de la mezcla reactante es 1000 kg/m^3.

La constante de velocidad vale $k = 4.48\cdot10^6\cdot\exp\left(\frac{-7500}{T}\right)$ s^{-1}

a) Determinar los valores de X y T de todos los estados estacionarios posibles y discútase su estabilidad.
b) Calcular la temperatura a la que sería conveniente introducir el alimento para obtener un único estado estacionario con un grado de conversión elevado.

Datos y notas

El calor de reacción vale –209000 kJ/kmol de A_1 y el calor específico medio de la mezcla alimento es 4.16 kJ/kg · K.

REACTOR

TIPO: RCTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0}\cdot X + \nu_k\cdot r\cdot\tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J\cdot X = 0$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

$c_1 = c_{10}\cdot(1-X)$; $\rho_m = 1000$ kmol/m^3

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = -209000$ kJ/kmol

$\overline{C}_{p_{medio}} = 4.16$ kJ/kg·K

CINÉTICA: $r = k\cdot c_1$; $k = 4.48\cdot10^6\cdot\exp\left[\frac{-7500}{T}\right]$ (s^{-1})

$$r = 4.48\cdot10^6\cdot\exp\left[\frac{-7500}{T}\right]\cdot c_{10}\cdot(1-X)$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
c_{10} = 3 kmol/m^3	V = 18·10^{-3} m^3
Q_{v0} = 6·10^{-5} m^3/s	*a)* X_{EE} = ? Y T_{EE} = ?
T_0 = 298 K	*b)* T_0 = ? para 1 EE

RESULTADOS

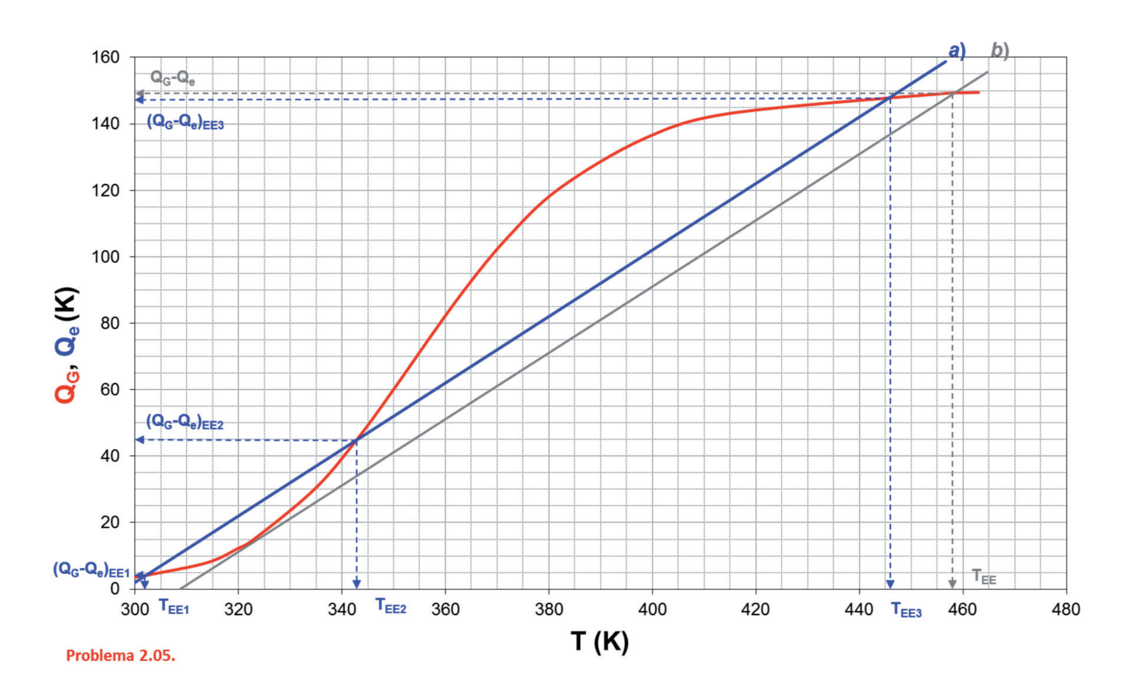


Figura 2.4. Resolución gráfica por Aris: Q_G = f(T) y Q_e = f(T)

Tabla 2.4. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
	EE1	302	4.5	0.03	ESTABLE
a)	EE2	343	45.2	0.30	INESTABLE
	EE3	446	147.7	0.98	ESTABLE
b)	EE1	458	149	0.99	ESTABLE

Al apartado *b)* le corresponde un valor de T_0 = 309 K

SOLUCIÓN: *a)* T_{EE1} = 302 K, X_{EE1} = 0.03

T_{EE2} = 343 K, X_{EE2} = 0.30

T_{EE3} = 446 K, X_{EE3} = 0.98

***b)* T_0 = 309 K**

Problema 2.06. En un reactor cuyo comportamiento fluidodinámico puede asimilarse a un RCTA se desarrolla la reacción gaseosa reversible y de primer orden $A_1 \leftrightarrow A_2$. Operando a 300 K el volumen de reacción necesario para obtener una conversión de 0.6 es de 0.1 m^3.

a) Utilizando el mismo caudal volumétrico de alimento calcular el volumen del reactor necesario para obtener el mismo grado de conversión si la temperatura de operación es de 400K.
b) Calcular la temperatura de operación que hará mínimo el volumen del reactor, para el caudal volumétrico y grado de conversión anteriores.

Datos y notas

La constante de velocidad de la reacción directa vale:

$$k = 10^3 \cdot \exp\left(\frac{-2400}{T}\right) \quad s^{-1}$$

A 300K la constante de equilibrio vale 10.
El calor de reacción a 300K vale –33490 J/mol de A_1 y el calor específico molar de las dos especies que participan en la reacción puede admitirse que tiene el mismo valor para cualquier temperatura.
Admítase que $T_0 = T$ en todos los casos considerados.

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \leftrightarrow A_2$

$c_1 = c_{10} \cdot (1 - X) \quad ; \quad c_2 = c_{20} + c_{10} \cdot X = c_{10} \cdot X$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = -33490 \text{ J/mol } A_1 \equiv -33490 \text{ kJ/kmol } A_1$

$\overline{C}_{p_1} = \overline{C}_{p_2}$

CINÉTICA: $k = 10^3 \cdot \exp\left[\frac{-2400}{T}\right] \ (s^{-1})$

$$K_{300} = 10$$

$$K = K^* \cdot \exp\left[\frac{-\Delta H_k^0}{R \cdot T}\right] \quad ; \quad 10 = K^* \cdot \exp\left[\frac{33490}{8.32 \cdot 300}\right] \quad \rightarrow \quad K^* = 1.49 \cdot 10^{-5}$$

$$r = k \cdot c_1 - k' \cdot c_2 = \; k \cdot c_1 - \frac{k}{K} \cdot c_2$$

$$r = 10^3 \cdot \exp\left[\frac{-2400}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot (1-X) - 67.11 \cdot 10^6 \cdot \exp\left[\frac{-6425.2}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot X$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
Q_{v0}	$T = 300K,\ X = 0.6,\ V = 0.1\ m^3$
$T_0 = T$	*a)* $T = 400K,\ X = 0.6 \rightarrow V = ?$
	b) $V = V_{min},\ X = 0.6 \rightarrow T = ?$

RESULTADOS

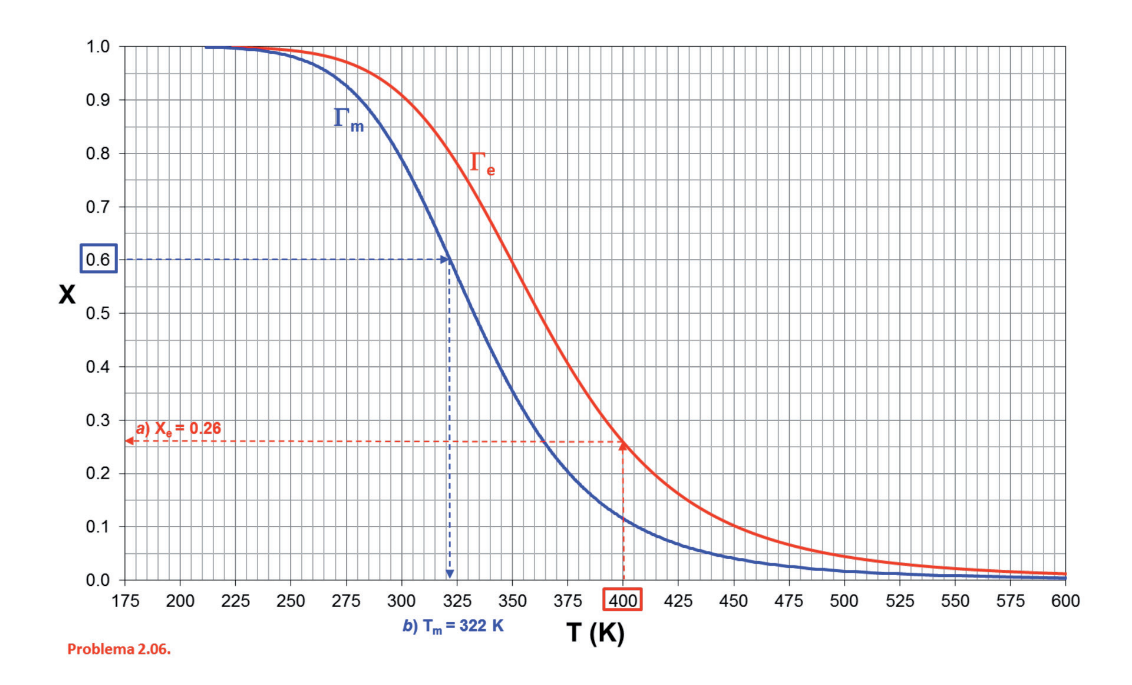


Figura 2.5. Representación de $X = f(T)$: curva Γ_e de equilibrio y curva Γ_m de máxima velocidad de reacción

SOLUCIÓN: ***a)*** **$Q_{v0} = 0.019\ m^3/s$**

$V = -3.5 \cdot 10^{-3}\ m^3$ (fuera de la condición de equilibrio, $X_e = 0.26$)

b) **$T_m = 322\ K$**

Problema 2.07. En un RCTA se está desarrollando en fase líquida la reacción irreversible de primer orden $A_1 \rightarrow A_2$. El reactor, de 10 m^3 de volumen, funciona en régimen estacionario y el alimento (exento de A_2) se introduce con un caudal volumétrico de 10^{-2} m^3/s y con una concentración de 5 kmol de A_1/m^3, siendo la densidad de la solución de 850 kg/m^3.

a) Para evitar que tenga lugar una reacción secundaria de formación de un producto indeseable se ha de procurar que la temperatura de reacción no supere los 340 K. Demostrar que si el alimento se introduce a 310 K y se monta un serpentín refrigerante, manteniendo la temperatura del fluido refrigerante al valor constante de 310 K, se podrá alcanzar un grado de conversión de 0.8 sin que se produzca el encendido de la reacción. Calcular el valor que el producto U · A debe tener.

b) En el caso de que la temperatura del alimento se redujera a 300 K, demostrar que, una vez alcanzado el estado estacionario, se continuaría obteniendo un grado de conversión de 0.8 si la temperatura del refrigerante se elevara hasta 331 K (manteniéndose prácticamente constante a lo largo de todo el serpentín). Comentar el papel que juega en este caso el serpentín de refrigeración. Supóngase que el valor del producto U · A es el obtenido en el apartado anterior.

Datos y notas

La constante de velocidad de la reacción vale $k = 10^{13} \cdot \exp\left(\frac{-12000}{T}\right) \quad s^{-1}$.

El calor de reacción vale –20000 kJ/kmol de A_1 y el calor específico medio de la solución vale 2.2 kJ/kg · K.

REACTOR

TIPO: RCTA, EE
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

$c_1 = c_{10} \cdot (1 - X) \quad ; \quad \rho_{solución} = 850 \text{ kg/m}^3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = -20000 \text{ kJ/kmol}$$

$$\overline{C}_{p_m} = 2.2 \text{ kJ/kg} \cdot \text{K}$$

CINÉTICA:

$$r = k \cdot c_1 = k \cdot c_{10} \cdot (1\text{-}X)$$

$$k = 10^{13} \cdot \exp\left[\frac{-12000}{T}\right] \quad (s^{-1})$$

$$r = 10^{13} \cdot \exp\left[\frac{-12000}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot (1\text{-}X)$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$x_{10} = 1, x_{20} = 0 ; Q_{v0} = 10^{-2}$ m³/s ; $c_{10} = 5$ kmol/m³	$V = 10$ m³
a) $T_0 = 310$ K	*a)* $T^* = 340$K, $T_{f0} = 310$K, $X = 0.8 \rightarrow U \cdot A = ?$
b) $T_0 = 300$ K	*b)* $T_{f0} = 331$K, $X = 0.8$

RESULTADOS

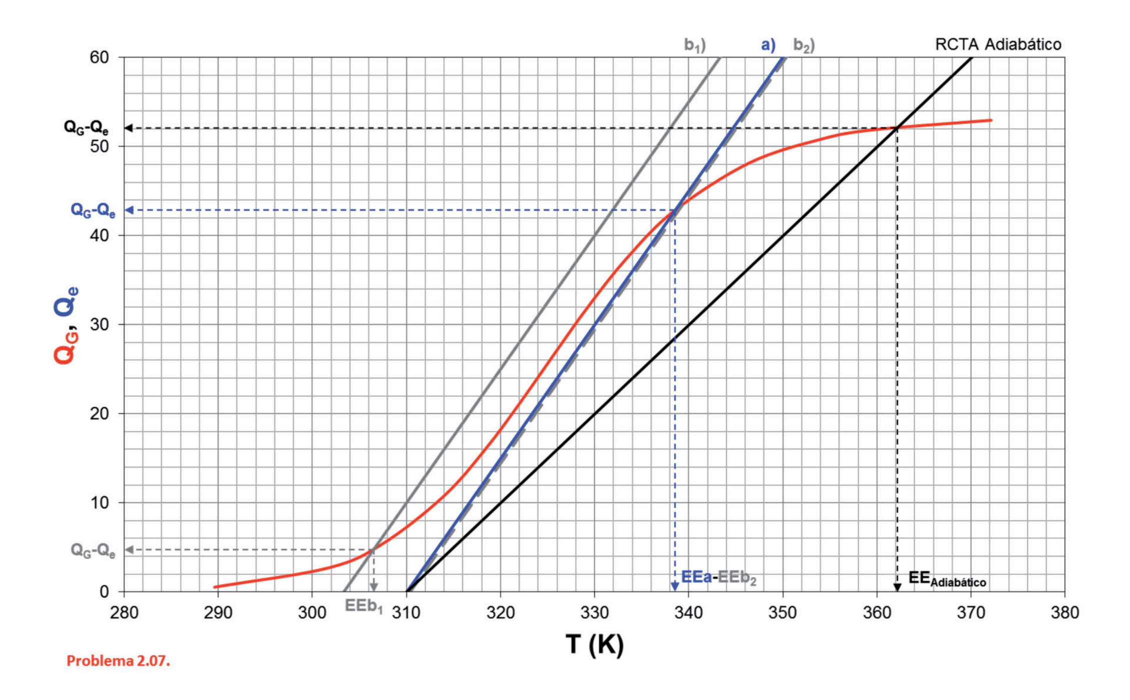


Figura 2.6. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$

Tabla 2.5. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
a)	EEa	338.5	42.9	0.8	ESTABLE
b_1)	EEb_1	306.5	4.8	0.09	ESTABLE
b_2)	EEb_2	338.5	42.9	0.8	ESTABLE
Adiabático	$EE_{Adiabático}$	362.0	52.0	0.97	ESTABLE

SOLUCIÓN: ***a*) T_{EEa} = 338.5 K, X_{EEa} = 0.8**

U·A = 9.43 kJ/s·K

***b*) T_{EEb} = 338.5 K, X_{EEb} = 0.8**

Problema 2.08. La reacción entre el tiosulfato sódico y el peróxido de hidrógeno (agua oxigenada) se lleva a cabo en un RCTA adiabático. Aunque se trata de una reacción muy compleja, en las condiciones de operación elegidas se puede representar mediante el esquema $H_2O_2 + 0.5Na_2S_2O_3 \rightarrow \text{productos}$:

a) Determinar, utilizando el método de Aris, los posibles estados estacionarios si el alimento entra al RCTA a 6 °C.

b) Si la temperatura del alimento crece de forma continua y gradual hasta alcanzar los 9 °C ¿Qué sucede con los estados estacionarios? ¿Se sigue obteniendo un grado de conversión bajo, como en el caso del apartado anterior?

Datos y notas

La densidad y los calores específicos permanecen constantes durante la reacción.

$c_{peróxido,0}$ = 1 kmol/m^3 ; $c_{tiosulfato,0}$ = 1.5 kmol/m^3

ΔH^0 = –293854 kJ/kmol de peróxido; calor específico del alimento = = 5141.4 kJ/K·kmol de peróxido

τ = 15 s

$$r = 6.81 \cdot 10^{11} \cdot c_1 \cdot c_2 \cdot \exp\left[-\frac{9260}{T}\right] \qquad (\text{mol}/\ell \cdot \text{s})$$

REACTOR

TIPO: RCTA, ADIABÁTICO

Nº REACCIONES: 1

FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q = 0$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + 0.5A_2 \rightarrow A_3$

$$c_1 = c_{10} \cdot (1 - X) \quad ; \quad c_2 = c_{20} - c_{10} \cdot \frac{\nu_2}{\nu_1} \cdot X$$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = -293854 \text{ kJ/kmol } A_1$$

$$\overline{C}p_{\text{alimento}} = 5141.4 \text{ kJ/kmol } A_1 \cdot K$$

CINÉTICA: $r = 6.8 \cdot 10^{11} \cdot c_1 \cdot c_2 \exp\left[\frac{-9260}{T}\right] \quad (\text{mol/l} \cdot \text{s}) \equiv (\text{kmol/m}^3 \cdot \text{s})$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
c_{10} = 1 kmol/m³ ; c_{20} = 1.5 kmol/m³	τ = 15 s
a) T_0 = 6 °C = 279 K	*a*) EE = ?
b) T_0 = 9 °C = 282 K	*b*) X = ?

RESULTADOS

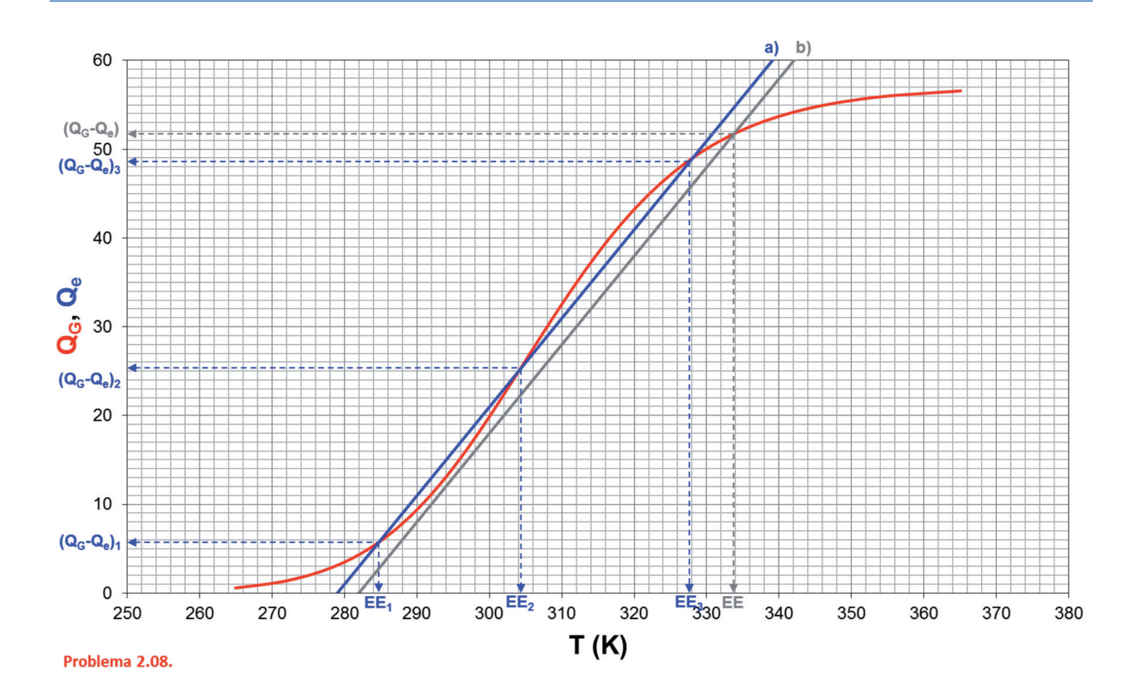


Figura 2.7. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$

Tabla 2.6. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
	EE1	284.8	5.8	0.10	ESTABLE
a)	EE2	304.4	25.4	0.44	INESTABLE
	EE3	327.6	48.6	0.85	ESTABLE
b)	EE	333.7	51.7	0.905	ESTABLE

SOLUCIÓN: ***a*) $T_{EE1} = 284.8$ K, $X_{EE1} = 0.10$**

$T_{EE2} = 304.4$ K, $X_{EE2} = 0.44$

$T_{EE3} = 327.6$ K, $X_{EE3} = 0.85$

***b*) X = 0.905**

Problema 2.09. El propilenglicol se obtiene por hidrólisis del óxido de propileno (OP), en presencia de ácido sulfúrico, según la reacción:

$$C_3H_6O + H_2O \xrightarrow{H_2SO_4} CH_2OH-CHOH-CH_3$$

que se desarrolla a temperaturas próximas a la ambiental cuando se utiliza ácido sulfúrico como catalizador.

Un ingeniero químico está encargado de supervisar el funcionamiento de un RCTA adiabático en el que se produce a escala industrial propilenglicol por el método descrito. Desgraciadamente el reactor está comenzando a deteriorarse, puesto que el ácido sulfúrico ataca al acero con el que está construido, y hay que reemplazarlo por uno nuevo. Buscando en el almacén el ingeniero químico encuentra un RCTA de 1.14 m^3 de volumen útil (con un revestimiento interior de vidrio que impedirá que el ácido sulfúrico ataque al acero con el que está construido el reactor) que no se usa y que se podría estudiar su utilización para producir el propilenglicol.

En la instalación actual se están alimentando 19.54 kmol/h de OP. El alimento consta de dos corrientes:

Corriente A: una mezcla equivolumétrica de OP (1.32 m^3/h) y de metanol (1.32 m^3/h).

Corriente B: una corriente de agua que contiene un 0.1% de ácido sulfúrico, siendo su caudal volumétrico 6.6 m^3/h.

El caudal molar de alimentación del metanol es 32.63 kmol/h y el del agua 364.5 kmol/h. La temperatura de las dos corrientes es 14.5 °C, antes de mezclarlas, pero hay un incremento instantáneo de 9.5 °C en la corriente que resulta debido al elevado calor de mezcla. En consecuencia la temperatura de entrada del alimento al reactor es 24 °C.

Furosawa estableció que en condiciones parecidas a las que opera el RCTA, la reacción es de primer orden respecto a la concentración de OP y de orden aparente cero respecto al agua que se utiliza en exceso. La variación de la constante cinética con la temperatura es de la forma:

$$k = 16.96 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left[-75362/\left(R \cdot T\right)\right] \quad (h^{-1})$$

viniendo la energía de activación expresada en J/mol.

En la operación hay una importante restricción: el OP es una sustancia de bajo punto de ebullición (a 1 atm. abs. hierve a 34.3 °C). Por lo tanto, con la mezcla que se está utilizando, el reactor no debe sobrepasar los 57 °C para evitar las pérdidas de OP a través del sistema de ventilación del reactor.

a) ¿Puede utilizarse el RCTA del almacén para sustituir el que se está deteriorando, funcionando de forma adiabática? Si se puede emplear, ¿cuál será la conversión de OP en propilenglicol en estado estacionario?

b) En el mismo almacén se encuentra también un serpentín en desuso que tiene un área útil de transmisión de calor de 5 m^2. Si el agua de refrigeración que se utiliza circula a través del serpentín con un caudal suficientemente grande para admitir que su temperatura permanece constante e igual a 29.5 °C, y para este caudal y las condiciones del reactor se sabe que el coeficiente global de transmisión de calor vale 1500 kJ/h·m^2·K, ¿podría instalarse este serpentín en el reactor del almacén para llevar a cabo la reacción, con las restricciones antes citadas, en el caso de que se incremente a 27 °C la temperatura de entrada del alimento? ¿Qué conversión y temperatura de estado estacionario resultarían?

Datos y notas

Entalpía de reacción = –85300 kJ/kmol de OP

Especie	ρ (kg/m^3)	C_p (J/mol·K)	M (g/mol)
OP	859	146.5	58.1
Agua	994	75.35	18
Propilenglicol	1036	192.6	76.1
Metanol	791	81.63	32

REACTOR

TIPO: RCTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q = 0$

REACCIÓN

ESQUEMA:

$$C_3H_6O + H_2O \xrightarrow[H_2SO_4]{CH_3OH} CH_2OH\text{-}CHOH\text{-}CH_3$$

$$A_1 + A_2 \xrightarrow[A_5]{A_4} A_3$$

$$c_1 = c_{10} - c_{10} \cdot \frac{\nu_1}{\nu_1} \cdot X = c_{10} \cdot (1 - X)$$

$$\rho_1 = 859,\ \rho_2 = 994,\ \rho_3 = 1036,\ \rho_4 = 791\ \text{kg/m}^3$$

$$M_1 = 58.1,\ M_2 = 18,\ M_3 = 76.1,\ M_4 = 32\ \text{kg/kmol}$$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_1^0 = -85300\ \text{kJ/kmol } A_1$$

$$\overline{C}_{p_1} = 146.5,\ \overline{C}_{p_2} = 75.35,\ \overline{C}_{p_3} = 192.6,\ \overline{C}_{p_4} = 81.63\ \ \text{kJ/kmol·K}$$

CINÉTICA:

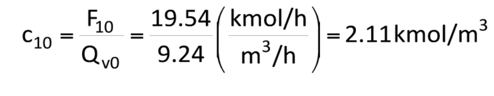
$$r = k \cdot c_1$$

$$k = 16.96 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left[\frac{-75362}{R \cdot T}\right] \quad (h^{-1})$$

DATOS Y NOTAS

A: F_{10} = 19.54 kmol/h; Q_{v1} = 1.32 m³/h; F_{40} = 32.63 kmol/h; Q_{v4} = 1.32 m³/h

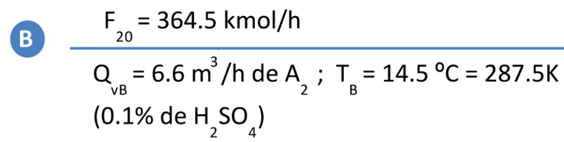
T_A = 14.5 ºC = 287.5K; Q_{vA} = 2.64 m³/h



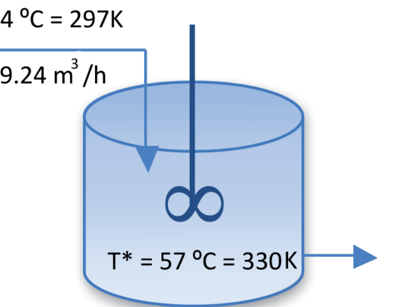
$$c_{10} = \frac{F_{10}}{Q_{v0}} = \frac{19.54}{9.24}\left(\frac{\text{kmol/h}}{\text{m}^3\text{/h}}\right) = 2.11\,\text{kmol/m}^3$$

T_0 = 24 ºC = 297K; Q_{v0} = 9.24 m³/h

B: F_{20} = 364.5 kmol/h



Q_{vB} = 6.6 m³/h de A_2 ; T_B = 14.5 ºC = 287.5K (0.1% de H_2SO_4)



a) Adiabático, V = 1.14 m³ → X = ?

b) INTERCAMBIADOR: A = 5m²

T_f = 29.5 ºC = 302.5 K = cte
U = 1500 kJ/h·m²·K
T_0 = 27 ºC = 300 K
T* = 57 ºC ≡ 330 K
V = 1.14 m³

→ X_{EE} = ?
T_{EE} = ?

RESULTADOS

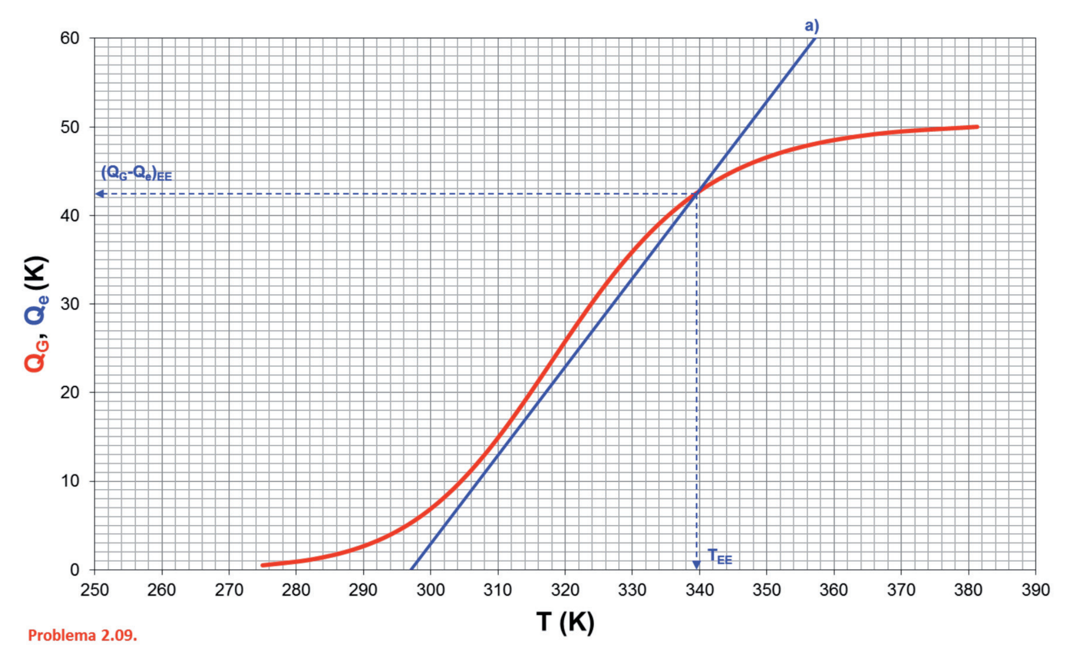


Figura 2.8. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$

Tabla 2.7. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
a)	EE	339.3	42.4	0.84	ESTABLE
b)	EE	329.0	35.0	0.69	ESTABLE

SOLUCIÓN: ***a*) T_{EEa} = 339.3 K, X_{EEa} = 0.84**

$T_{EEa} > T^*$, no se puede utilizar el reactor del almacén

***b*) T_{EEb} = 329 K, X_{EEb} = 0.69**

$T_{EEb} < T^*$, sí se puede utilizar el reactor con el intercambiador de calor

Problema 2.10. Una reacción exotérmica, de primer orden, en fase líquida, de la forma $A_1 \rightarrow \text{productos}$, tiene lugar en un RCTA de 4 m^3. Los parámetros de la ecuación de Arrhenius para este sistema son $A = 2 \cdot 10^{13}\ s^{-1}$ y $E = 100000$ kJ/kmol. La entalpía es –50000 kJ/kmol y el calor específico de la mezcla de reacción 4 kJ/kg · K. La densidad media de la mezcla de reacción es 1000 kg/m^3.

a) Si la concentración del alimento es 4 kmol/m^3, el caudal 0.005 m^3/s, y el RCTA opera de forma adiabática, calcular los estados estacionarios cuando la temperatura del alimento es 290, 297 y 305 K.

b) ¿Cuál es el mínimo valor de la temperatura del alimento, en condiciones adiabáticas, y cuales son los valores de X y T del estado estacionario que le corresponde?

c) Si la temperatura del alimento es 297 K, se desea obtener un grado de conversión de 0.932 y que únicamente exista un estado estacionario, es necesario recurrir a una RCTA con intercambio de calor. Calcular el valor de U · A del sistema de intercambio de calor si se dispone de un fluido intercambiador que se encuentra a 360 K y puede admitirse que su temperatura permanece prácticamente constante durante la operación de intercambio.

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q$

REACCIÓN

ESQUEMA:

$$A_1 \rightarrow A_2$$

$$\rho_1 = 1000 \text{ kg/m}^3$$

$$c_1 = c_{10} - c_{10} \cdot \frac{\nu_1}{\nu_1} \cdot X = c_{10} \cdot (1 - X)$$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = -50000 \text{ kJ/kmol}$$

$$\bar{C}_{p_m} = 4 \text{ kJ/kg} \cdot \text{K}$$

CINÉTICA:

$$r = k \cdot c_1 = k \cdot c_{10} \cdot (1 - X)$$

$$\left.\begin{array}{l} A = 2 \cdot 10^{13}\ s^{-1} \\ E = 100000 \text{ kJ/kmol} \end{array}\right\} \rightarrow k = A \cdot \exp\left[\frac{-E}{R \cdot T}\right] = 2 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left[\frac{-100000}{R \cdot T}\right]$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
c_{10} = 4 kmol/m^3 Q_{v0} = 0.005 m^3/s	V = 4m^3

a) Adiabático, T_0 = 290, 297 y 305 K → EE = ?
b) Adiabático, $T_0 = T_{min}$ → X_{EE} = ? y T_{EE} = ?
c) INTERCAMBIADOR: T_{f0} = 360 K = cte; T_0 = 297; X = 0.932 → U·A = ?

RESULTADOS

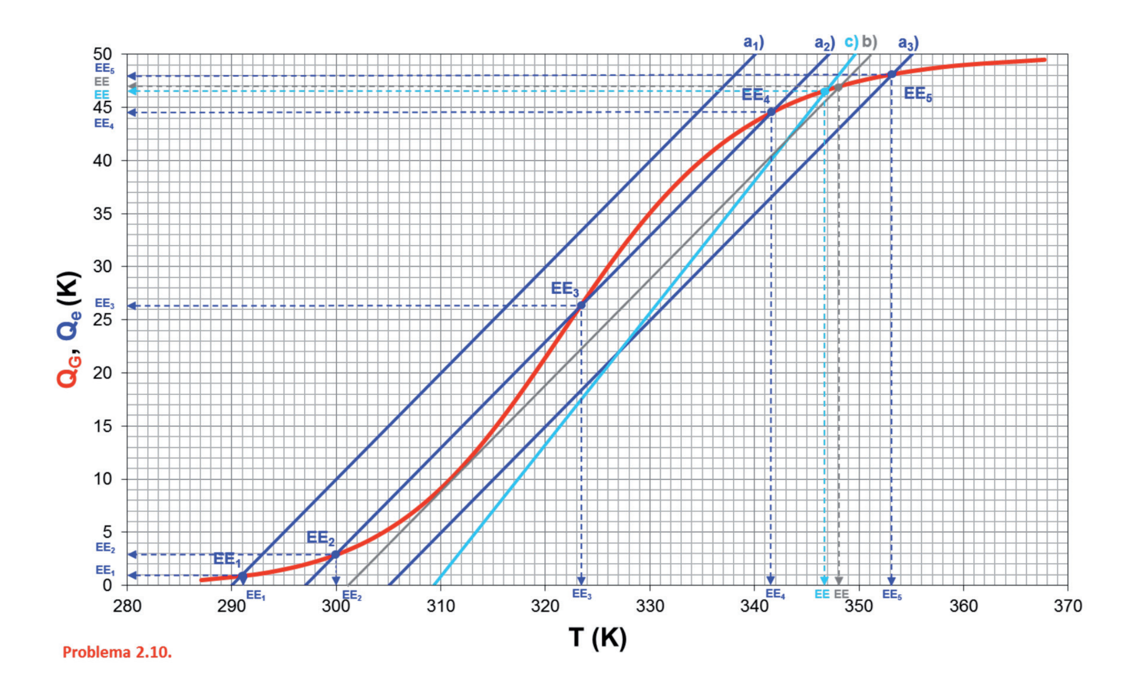


Figura 2.9. Resolución gráfica por Aris: Q_G = f(T) y Q_e = f(T)

Tabla 2.8. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
a₁)	EE_1	290.8	0.9	0.02	ESTABLE
	EE_2	299.9	2.9	0.06	ESTABLE
a₂)	EE_3	323.3	26.3	0.53	INESTABLE
	EE_4	341.6	44.6	0.89	ESTABLE
a₃)	EE_5	353.0	48.0	0.96	ESTABLE
b)	EE	348.0	47.0	0.94	ESTABLE
c)	EE	346.8	46.6	0.932	ESTABLE

SOLUCIÓN:	***a)***	$\mathbf{T_0 = 290\ K} \rightarrow$	$\mathbf{T_{EE1} = 290.8\ K,\ X_{EE1} = 0.02}$
		$\mathbf{T_0 = 297\ K} \rightarrow$	$\mathbf{T_{EE2} = 299.9\ K,\ X_{EE2} = 0.06}$ $\mathbf{T_{EE3} = 323.3\ K,\ X_{EE3} = 0.53}$ $\mathbf{T_{EE4} = 341.6\ K,\ X_{EE4} = 0.89}$
		$\mathbf{T_0 = 305\ K} \rightarrow$	$\mathbf{T_{EE5} = 353\ K,\ X_{EE5} = 0.96}$
	b)	$\mathbf{T_0 = 301\ K} \rightarrow$	$\mathbf{T_{EE} = 348\ K,\ X_{EE} = 0.94}$
	c)	$\mathbf{U \cdot A = 4.85}$	**kJ/s·K**

Problema 2.11. Una reacción endotérmica, de primer orden, en fase líquida, de la forma $A_1 \rightarrow \text{productos}$ tiene lugar en un RCTA. La concentración del alimento es 1.25 kmol/m^3, el caudal de alimentación 0.02 m^3/s, y el volumen del reactor es 20 m^3. La entalpía de la reacción es 50000 kJ/kmol de A, el calor específico de la mezcla de reacción es 3 kJ/kg · K y su densidad 900 kg/m^3.

a) Si la temperatura del alimento es de 300 K, calcular la temperatura de un fluido intercambiador de calor que circula por el interior de un serpentín, para que la temperatura de reacción coincida con la temperatura del alimento. ¿Qué grado de conversión se obtendrá?

b) Si no existiera el serpentín y el RCTA fuera adiabático, ¿cuál debería ser la temperatura del alimento para obtener el mismo resultado?

Datos y notas

A 300 K la constante de velocidad es $k = 4 \cdot 10^{-3}\ s^{-1}$.
Para el serpentín puede asumirse que U · A = 10 kJ/s · K y que la temperatura del fluido intercambiador permanece prácticamente constante durante el proceso de intercambio.

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = K \cdot (T_{f_0} - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$; $\rho_1 = 900\ kg/m^3$; $c_1 = c_{10} \cdot (1 - X)$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_1^0 = 50000 \text{ kJ/kmol}$$

$$\overline{C}_{p_1} = 3 \text{ kJ/kg}\cdot\text{K}$$

CINÉTICA: $r = k\cdot c_1 = k\cdot c_{10}\cdot(1-X)$

$$k = 4\cdot 10^{-3}\ s^{-1} \quad (\text{para } T = 300 \text{ K})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 300$ K	$V = 20$ m^3
$Q_{v0} = 0.02$ m^3/s	*a)* $T_f = ?$ y $X = ?$ (T = 300 K)
$c_{10} = 1.25$ Kmol/m^3	*b)* $T_0 = ?$ (RCTA ADIABÁTICO)

INTERCAMBIADOR: $U\cdot A = 10$ kJ/s·K

$$T_f = T_{f_0} = \text{cte}$$

RESULTADOS

SOLUCIÓN: ***a)*** **$T_f = 400$ K y $X = 0.8$**
b) **$T_0 = 318.5$ K**

Problema 2.12. La reacción de primer orden $A_1 \rightarrow A_2$ se desarrolla en un RCTA adiabático. Determinar los posibles estados estacionarios (como parejas temperatura – grado de conversión) para las siguientes condiciones de operación:

$$\rho_{media} = 1000\,kg/m^3 \;\; ; \;\; c_{10} = 3\,kmol/m^3 \;\; ; \;\; T_0 = 298K \;\; ; \;\; Q_{v0} = 6\cdot 10^{-5} \;\; m^3/s$$
$$V = 0.018 \;\; m^3$$
$$r = k\cdot c_1 \;\; ; \;\; k = e^{\left[15.32 - \frac{7550}{T}\right]}\; s^{-1}$$
$$\Delta H_1^0 = -50000\,kcal/kmol \;\; ; \;\; C_{p,media} = 1 \;\; kcal/kg\cdot K$$

REACTOR

TIPO: RCTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0}\cdot X + \nu_k\cdot r\cdot\tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J\cdot X = Q = 0$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

$\rho_{media} = 1000\ \text{kg/m}^3$

$c_1 = c_{10} \cdot (1 - X)$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\underline{\Delta H}_1^0 = -50000\ \text{kcal/kmol}$

$\overline{C}_{p_m} = 1\ \text{kcal/kg} \cdot \text{K}$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1$

$$k = \exp\left[15.32 - \frac{7550}{T}\right] \quad (s^{-1})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 298$ K	$V = 0.018\ m^3$
$c_{10} = 3\ \text{kmol/m}^3$	*a)* EE = ?
$Q_{v0} = 6 \cdot 10^{-5}\ m^3/s$	

RESULTADOS

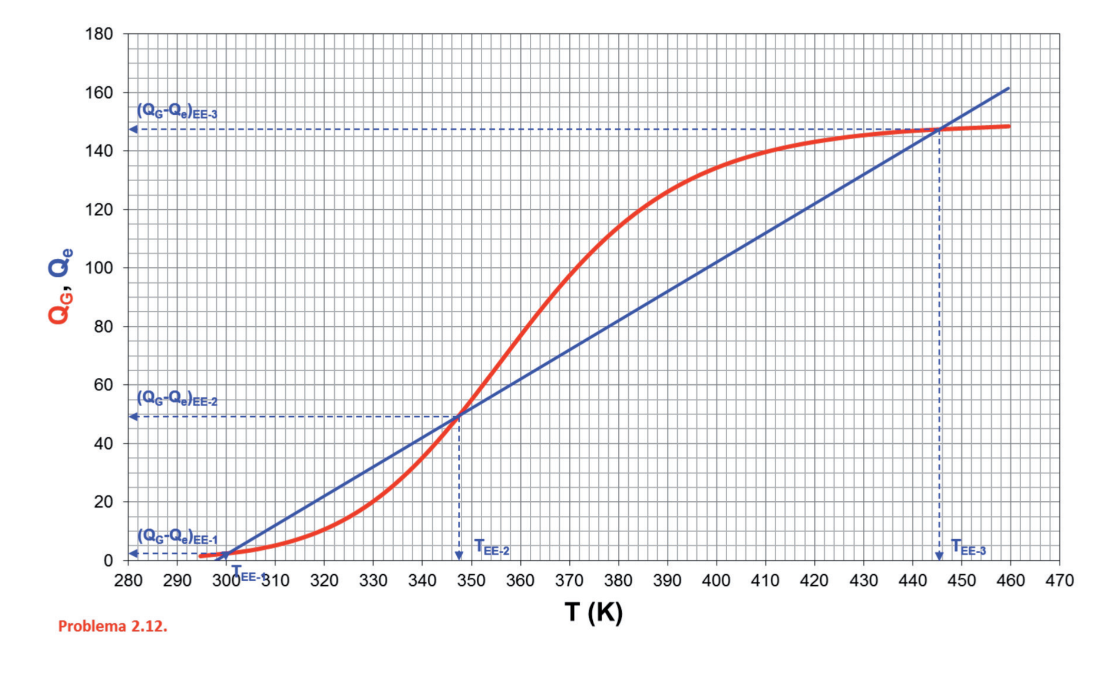


Figura 2.10. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$

Tabla 2.9. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
EE_1	300.0	2.0	0.01	ESTABLE
EE_2	347.5	49.9	0.33	INESTABLE
EE_3	445.3	147.3	0.98	ESTABLE

SOLUCIÓN: $T_{EE1} = 300$ K, $X_{EE1} = 0.01$

$T_{EE2} = 347.5$ K, $X_{EE2} = 0.33$

$T_{EE3} = 445.3$ K, $X_{EE3} = 0.98$

Problema 2.13. La reacción endotérmica, en fase líquida, de primer orden e irreversible $A_1 \rightarrow A_2 + A_3$ tiene lugar en un RCTA que opera en estado estacionario. Si la temperatura del alimento es 310K, calcular la temperatura a la que se debe mantener el fluido calefactor, que circula por un serpentín, para conseguir una conversión de 0.75.

Datos y notas

$\rho_{\text{fase líquida}} = 950$ kg/m^3 ; $c_{10} = 0.8$ kmol/m^3 ; $Q_{V0} = 8.3 \cdot 10^{-3}$ m^3/s
$V = 15$ m^3
$A = 3.5 \cdot 10^{13}$ s^{-1} ; $E = 100000$ kJ/kmol
$\Delta H_k^0 = 51000$ kJ/kmol ; $C_{p,\text{fase líquida}} = 3.5$ kJ/kg·K
$U \cdot A = 10$ kJ/s · K

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q = K \cdot (T_{f_0} - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2 + A_3$

$\rho_{\text{fase líquida}} = 950 \quad \text{kg/m}^3$

$c_1 = c_{10} \cdot (1 - X)$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = 51000 \text{ kJ/kmol}$$

$$\overline{C}p_{,\text{ fase liquida}} = 3.5 \text{ kJ/kg} \cdot \text{K}$$

CINÉTICA:

$$A = 3.5 \cdot 10^{13} s^{-1} \quad ; \quad E = 100000 \text{ kJ/kmol}$$

$$k = 3.5 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left[\frac{-10000}{R \cdot T}\right] = 3.5 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left[\frac{-12027.9}{T}\right]$$

$$r = k \cdot c_1 = k \cdot c_{10} \cdot (1 - X)$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 310$ K	$X = 0.75$
$Q_{v0} = 8.3 \cdot 10^{-3}$ m^3/s	$V = 15$ m^3
$c_{10} = 0.8$ kmol/m^3	$T_f = ?$

INTERCAMBIADOR: $U \cdot A = 10$ kJ/s $\cdot$ K

$$T_f = T_{f_0} = \text{cte}$$

RESULTADOS

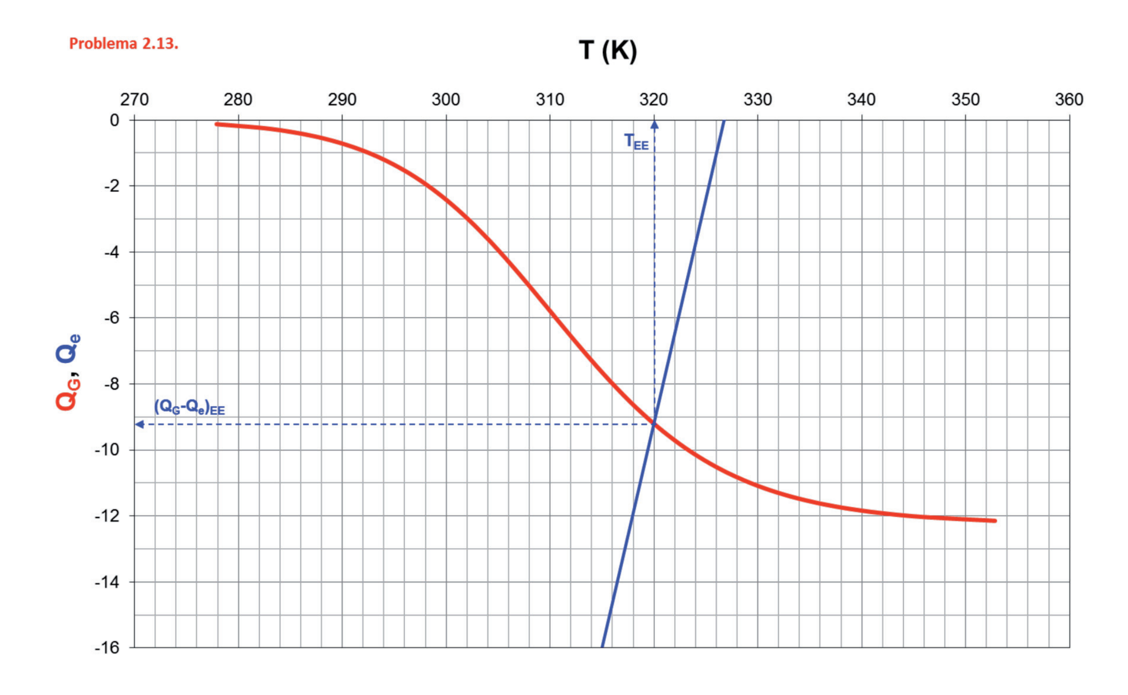


Figura 2.11. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$

Tabla 2.10. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
EE	320	-9.2	0.75	ESTABLE

SOLUCIÓN: $T_f = 373.1$ K

Problema 2.14. Se desea polimerizar estireno en un RCTA adiabático. La reacción de polimerización es irreversible y de primer orden. En un experimento de laboratorio se ha encontrado que el incremento de temperatura cuando el alimento se convierte totalmente es de 400 K.

a) Determinar la temperatura y el grado de conversión a la salida del reactor.
b) Si la temperatura máxima permisible es de 540 K, ¿resulta adecuada la operación adiabática?
c) Si la respuesta al apartado anterior es negativa, ¿qué prestaciones debería tener el equipo de refrigeración y a qué condiciones de temperatura y grado de conversión trabajaría el reactor? Discutir la estabilidad de dichas condiciones.

Datos y notas

T_0= 300 K ; t = 2 h; $k = 10^{10} \cdot \exp\left[-\frac{10000}{T}\right] (h^{-1})$

REACTOR

TIPO: RCTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T - T_0 - J \cdot X = Q = 0$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

$c_1 = c_{10} \cdot (1 - X)$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta X = 1 \rightarrow \Delta T = 400$ K

$T - T_0 = J \cdot X \rightarrow 400 = J \cdot 1 \rightarrow J = 400$ K

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 = k \cdot c_{10} \cdot (1 - X)$

$$k = 10^{10} \cdot \exp\left[\frac{-10000}{T}\right] \quad (h^{-1})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 300$ K	$t = 2$ h *a*) $T_{EE} = ?$, $X_{EE} = ?$ *b*) $T^* = 540$ K → ¿Adiabático? *c*) ¿I.C.? → $T_{EE} = ?$, $X_{EE} = ?$

RESULTADOS

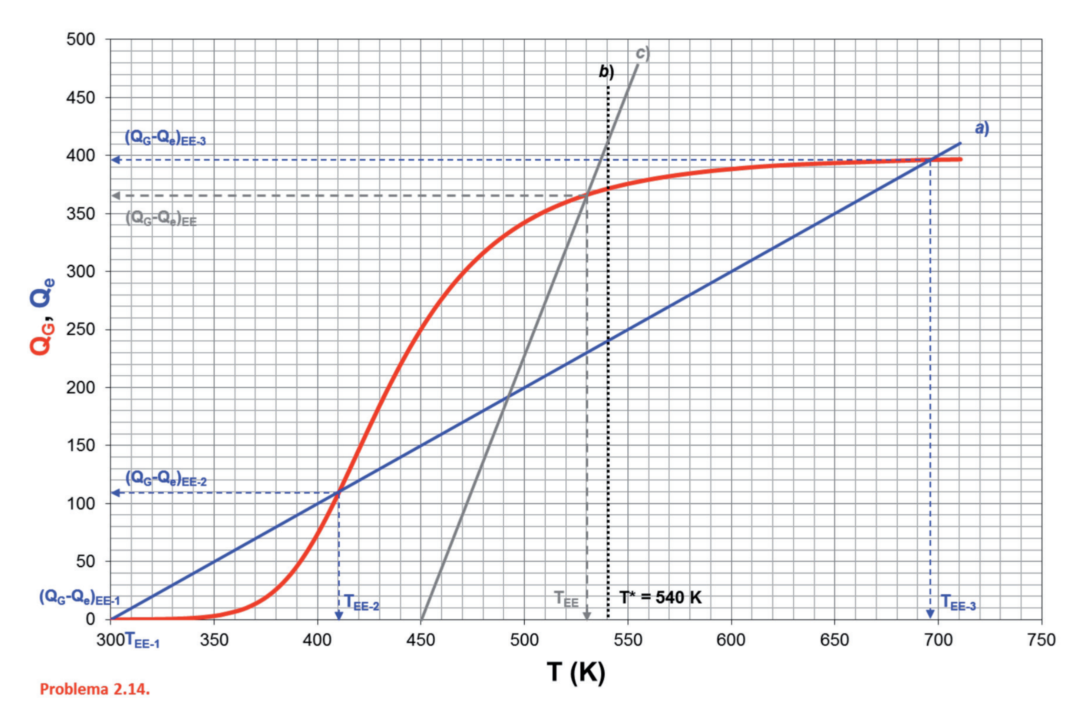


Figura 2.12. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$

Tabla 2.11. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
	EE_1	300	0	0	ESTABLE
a)	EE_2	410	110	0.28	INESTABLE
	EE_3	695	395	0.99	ESTABLE
c)	EE	530	366	0.92	ESTABLE

La recta del apartado *c*) le corresponde una $T_f = T_{f0} = 492$ K y un valor de $k = 3.571$

SOLUCIÓN: *a*) $T_{EE1} = 300$ K, $X_{EE1} = 0$

$T_{EE2} = 410$ K, $X_{EE2} = 0.28$

$T_{EE3} = 695$ K, $X_{EE3} = 0.99$

b) No es adecuada ya que T>T*

c) $T = 530$ K, $X = 0.92$, $T_{f0} = 492$ K, $k = 3.571$

Problema 2.15. En un RCTA con intercambio de calor se llevan a cabo en fase líquida dos reacciones consecutivas, irreversibles y de primer orden, que responden a los esquemas de reacción:

$$A_1 \xrightarrow{i=1} A_2 \xrightarrow{i=2} A_3 \quad .$$

El tiempo espacial del RCTA es de 10 minutos. Se alimenta A puro a 273 K.

a) Determinar el número de estados estacionarios posibles, calculando los valores de c_j y T e indicando si son estables o inestables.
b) Proponer unas condiciones de trabajo que permitan aumentar la selectividad de A_2. Justificarlo gráficamente.
c) Proponer unas condiciones de trabajo que permitan aumentar la selectividad de A_3. Justificarlo gráficamente.

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 2
FASE: LÍQUIDA
BALANCE DE MATERIA: $c_j - c_{j0} = \tau \cdot \sum_{i=1}^{2} \nu_{ij} \cdot r_i$

BALANCE DE ENERGÍA: $\kappa \cdot (T_{f_0} - T) = T - T_0 - \frac{\tau}{c_{k0}} \cdot \sum_{i=1}^{2} (-\nu_{ik}) \cdot r_i \cdot J_i$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \xrightarrow{i=1} A_2 \xrightarrow{i=2} A_3$

$c_1 = c_{10} \cdot (1 - X)$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = -41840$ kJ/kmol ; $\Delta H_2^0 = -50208$ kJ/kmol

$\overline{C}_{p_1} = 12.55$ kJ/kmol·K

CINÉTICA:

$$k_1 = 2.5\cdot10^9\cdot\exp\left[\frac{-8000}{T}\right] \quad (min^{-1}) \quad ; \quad k_2 = 2\cdot10^8\cdot\exp\left[\frac{-11000}{T}\right] \quad (min^{-1})$$

$$r_1 = k_1\cdot c_1 \quad ; \quad r_2 = k_2\cdot c_2$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$x_{10} = 1$ $T_0 = 273$ K	$\tau = 10$ min *a*) ¿EE? → T_{EE} = ?, $(c_j)_{EE}$ = ? *b*) Condiciones para c_2 = max *c*) Condiciones para c_3 = max

INTERCAMBIADOR: $T_{f_0} = 273$ K

$\kappa = 20$

RESULTADOS

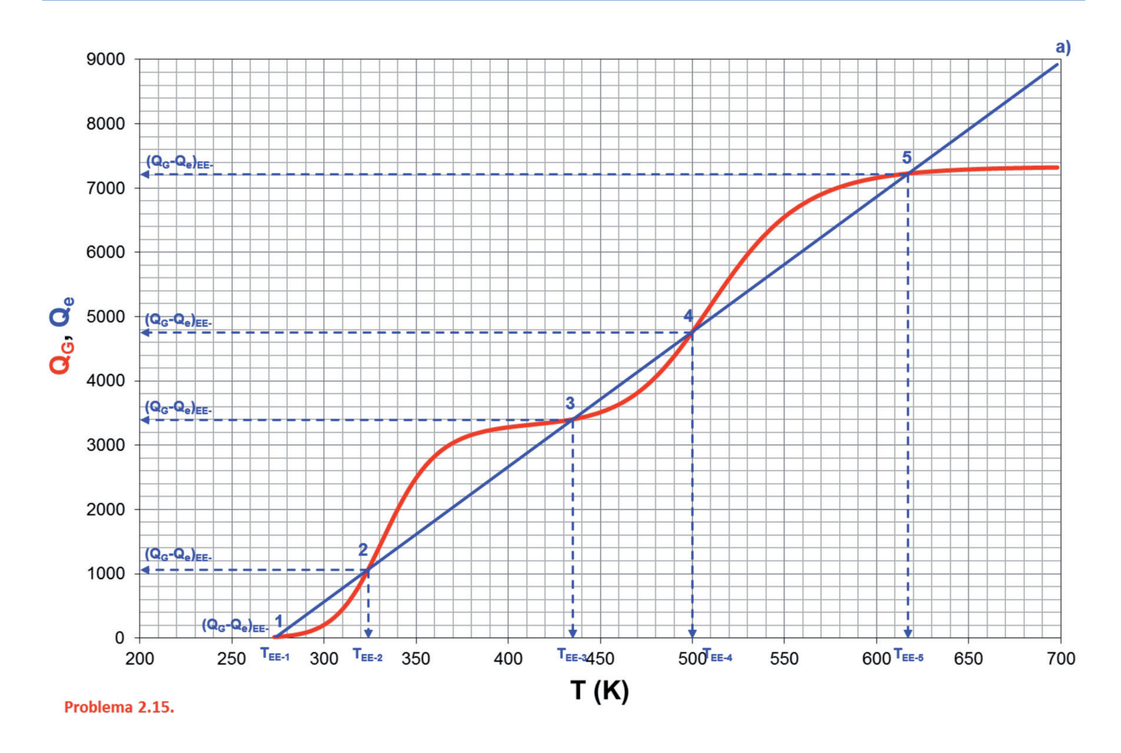


Figura 2.13. Resolución gráfica por Aris: Q_G = f(T) y Q_e = f(T) (apartado *a*)

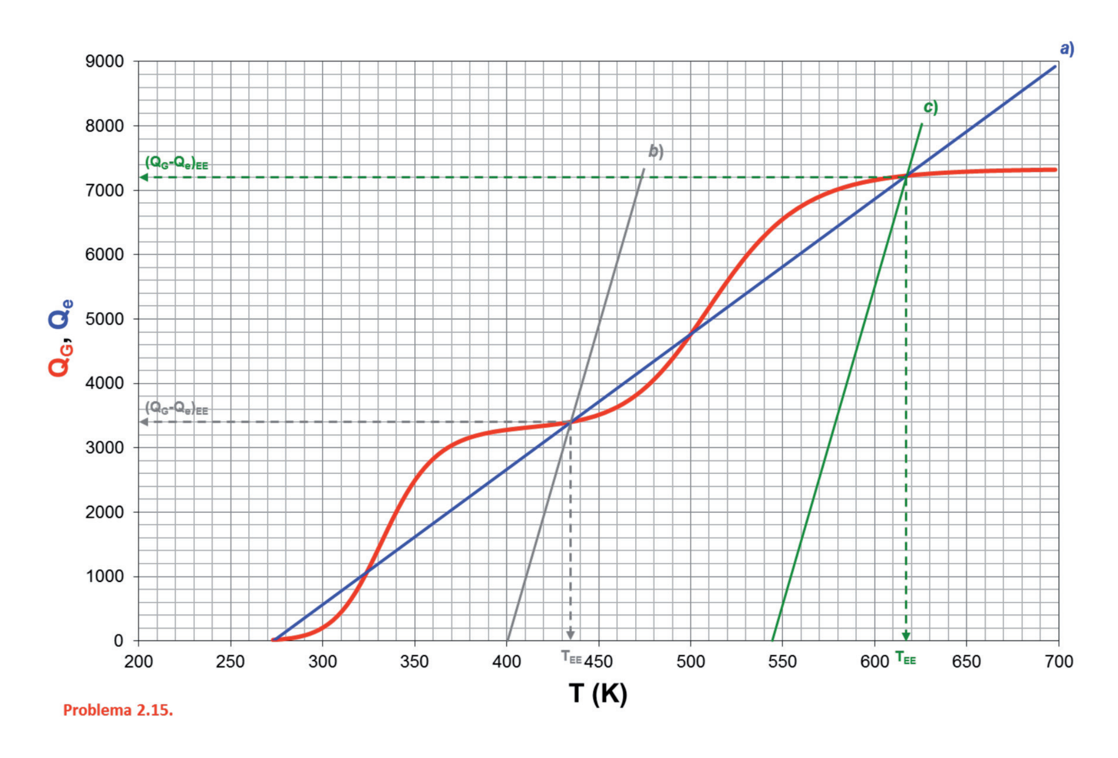


Figura 2.14. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$ (apartados *b* y *c*)

Tabla 2.12. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	Estabilidad	c_1/c_{10}	c_2/c_{10}	c_3/c_{10}
	EE_1	272	-21	ESTABLE	0.996	0.004	≈0
	EE_2	324	1071	INESTABLE	0.679	0.321	≈0
a)	EE_3	435	3402	ESTABLE	0.004	0.976	0.020
	EE_4	500	4767	INESTABLE	≈0	0.642	0.358
	EE_5	617	7224	ESTABLE	≈0	0.027	0.973
b)	EE	435	3402	ESTABLE	0.004	0.976	0.020
c)	EE	617	7224	ESTABLE	≈0	0.027	0.973

SOLUCIÓN: ***a*)** $T_{EE1} = 272$ K, $(c_1/c_{10})_{EE1} = 0.996$, $(c_2/c_{10})_{EE1} = 0.004$, $(c_3/c_{10})_{EE1} \approx 0$

$T_{EE2} = 324$ K, $(c_1/c_{10})_{EE2} = 0.679$, $(c_2/c_{10})_{EE2} = 0.321$, $(c_3/c_{10})_{EE2} \approx 0$

$T_{EE3} = 435$ K, $(c_1/c_{10})_{EE3} = 0.004$, $(c_2/c_{10})_{EE3} = 0.976$, $(c_3/c_{10})_{EE3} = 0.020$

$T_{EE4} = 500$ K, $(c_1/c_{10})_{EE4} \approx 0$, $(c_2/c_{10})_{EE4} = 0.642$, $(c_3/c_{10})_{EE4} = 0.358$

$T_{EE5} = 617$ K, $(c_1/c_{10})_{EE5} \approx 0$, $(c_2/c_{10})_{EE5} = 0.027$, $(c_3/c_{10})_{EE5} = 0.973$

***b*)** $T = 435$ K, $T_0 = 273$ K, $T_{f0} = 401.3$ K, $k = 97.7$

***c*)** $T = 617$ K, $T_0 = 273$ K, $T_{f0} = 546.6$ K, $k = 97.7$

Problema 2.16. En un RCTA adiabático se lleva a cabo una reacción irreversible, de primer orden, en fase líquida, de la forma: $A_1 \rightarrow \text{Productos}$.

a) Determinar la temperatura del alimento (T_0) en que se produce el encendido cuando el caudal volumétrico de alimentación es 0.1 l/min, 10 l/min y 100 l/min. Comentar el resultado.

b) Si la temperatura inferior a la que se puede se puede introducir el alimento es 15 °C, calcular el caudal máximo del alimento para el que se puede conseguir el apagado del reactor por descenso de la temperatura de alimentación. Construir la curva de $Q_{V0} = f(T_{EE})$ para la temperatura de alimento de 15 °C.

Datos y notas

Volumen de reacción = 1 m^3

Entalpía de reacción = –52300 kJ/kmol de A; $\sum_{j=1}^{j=S} \theta_j \overline{C}p_j = 514.6$ kJ/kmol · K

REACTOR

TIPO: RCTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot X$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = -52300 \text{ kJ/kmol } A_1$$

$$\sum_{j=1}^{j=S} \theta_j \overline{C}p_j = 514.6 \text{ kJ/kmol} \cdot \text{K}$$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 = k \cdot c_{10} \cdot (1 - X)$

$$E/R = 13200 \text{ K} \quad \text{y} \quad A = 7.1 \cdot 10^{12} \text{ min}^{-1} \Rightarrow k = 7.1 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left[\frac{-13200}{T}\right] \quad (\text{min}^{-1})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
a) Q_{v0} = 0.1, 10 y 100 l/min → T_0 = ?	V = 1 m^3 = 1000 l
b) T_0 = 15 °C = 288 K	*b*) ¿Q_{v0} = f(T)?, $(Q_{v0})_{max}$ = ?

RESULTADOS

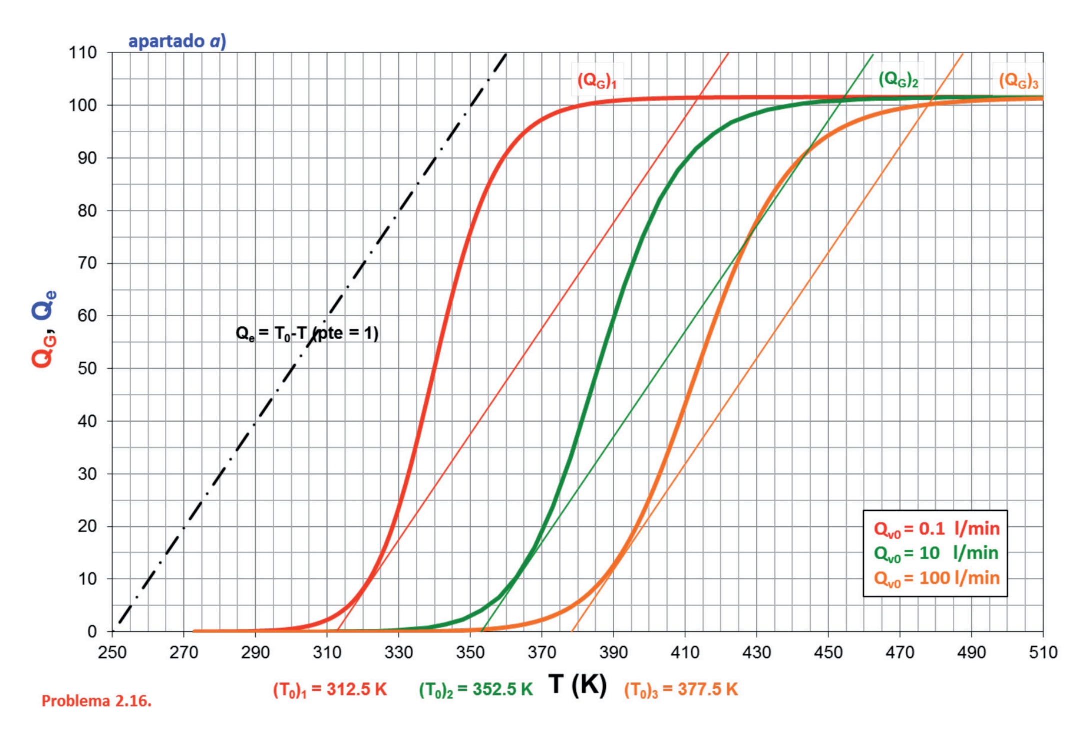


Figura 2.15. Resolución gráfica por Aris: Q_G = f(T) y Q_e = f(T). Apartado *a*, Q_{v0} = 0.1, 10 y 100 l/min

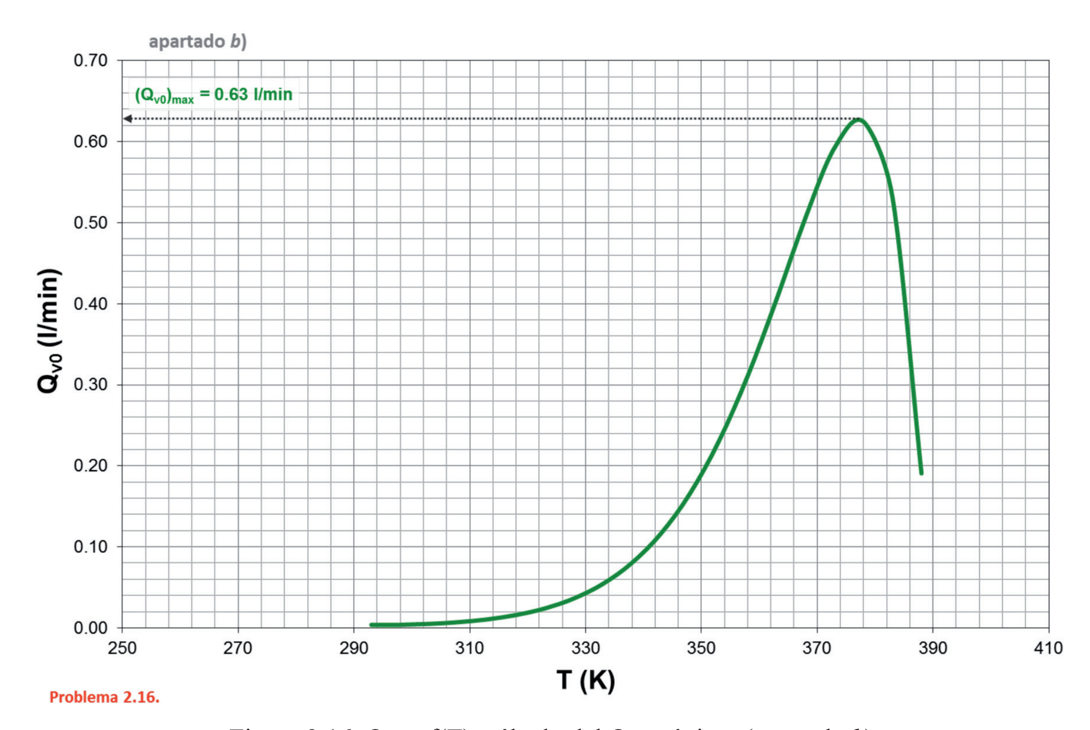


Figura 2.16. Q_{v0} = f(T): cálculo del Q_{v0} máximo (apartado *b*)

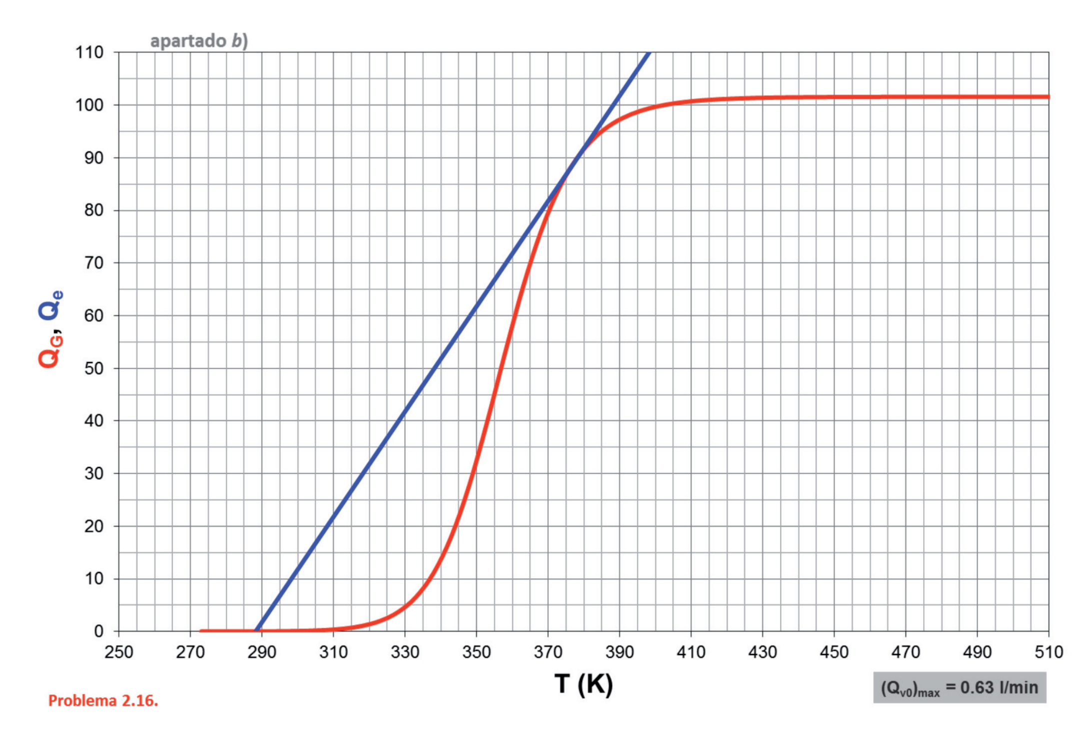


Figura 2.17. Resolución gráfica por Aris, $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$, para $(Q_{v0})_{max} = 0.63$ l/min (apartado *b*)

SOLUCIÓN: ***a*) $Q_{v0} = 0.1$ l/min → $T_0 = 312.5$ K (39.5 °C)**

$Q_{v0} = 10$ l/min → $T_0 = 352.5$ K (79.5 °C)

$Q_{v0} = 100$ l/min → $T_0 = 377.5$ K (104.5 °C)

***b*) $(Q_{v0})_{max} = 0.63$ l/min**

Problema 2.17. La reacción en fase líquida, exotérmica, irreversible y de orden cero $A_1 \rightarrow A_2$ tiene lugar a 85°C en un RCTA de 0.2 m^3 provisto de una camisa de intercambio de calor. La temperatura del fluido refrigerante se mantiene constante a 0 ºC. El coeficiente de transmisión de calor es 120 $W/m^2 \cdot K$. Determinar:

a) El grado de conversión alcanzado
b) El área de transmisión de calor
c) Haciendo uso de las funciones Q_G y Q_e, y de su representación, indicar qué sucedería si:
*c*1) si aumentara el área de transmisión de calor
*c*2) si disminuyera el área de transmisión de calor

Datos y notas

La densidad de la solución es 0.90 kg/dm^3.
La temperatura del alimento es 40 °C y el caudal de alimentación 90 kg/min.
El peso molecular de A_1 es 90 g/mol.

k = 1.127 kmol/m^3·min a 40 °C ; k = 1.421 kmol/m^3·min a 50 °C.
El calor de reacción es –250 J/g y el calor específico de la solución es 2 J/g · K.

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0 \;\; ; \;\; F_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot V = 0$

BALANCE DE ENERGÍA:

$$T - T_0 - J \cdot X = Q = \kappa \cdot (T_{f_0} - T) \;\; \Rightarrow \;\; J \cdot X = -(T_0 + \kappa \cdot T_{f_0}) + (1+\kappa) \cdot T$$

$$\kappa = \frac{U \cdot A}{F_{k_0} \cdot \sum \theta_j \overline{C}_{p_j}}$$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

$\rho_s = 0.90 \text{ kg/dm}^3 \equiv 900 \text{ kg/m}^3$

$M_1 = 90 \text{ g/mol} \equiv 90 \text{ kg/kmol}$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = -250 \text{ J/g}$

$\overline{C}_{p_m} = 2 \text{ J/g} \cdot \text{K}$

CINÉTICA: $r = k$

$$\left.\begin{array}{l} T = 40°C = 313 \text{ K} \rightarrow k = 1.127 \text{ kmol/m}^3 \cdot \text{min} \\ T = 50°C = 323 \text{ K} \rightarrow k = 1.421 \text{ kmol/m}^3 \cdot \text{min} \end{array}\right\} k = 2011.8 \cdot \exp\left[\frac{-2343.5}{T}\right]$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
T_0 = 40 °C = 313 K	T = 85 °C = 358 K, V = 0.2 m^3
m_{10} = 90 kg/min	*a*) X = ?
	b) A = ?
	c) ¿A? , ¿A$^-$?

INTERCAMBIADOR: $T_{f_0} = 0°C = 273 \text{ K}$

$U = 120 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K} \equiv 7.2 \text{ kJ/min} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}$

Tabla 2.13. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

k (kmol/m³·min)	T (K)	ln k	1/T (K^{-1})
1.127	313	0.120	0.00319
1.421	323	0.351	0.00310

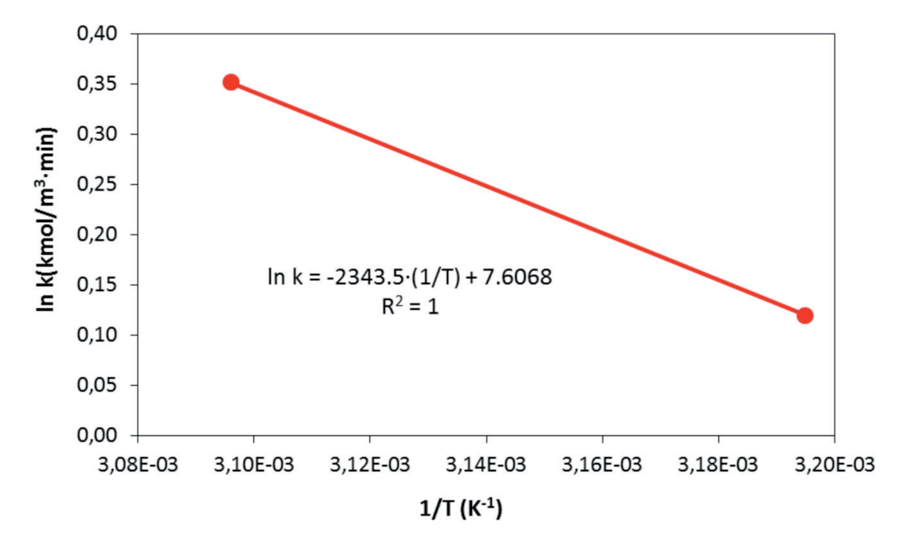


Figura 2.18. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

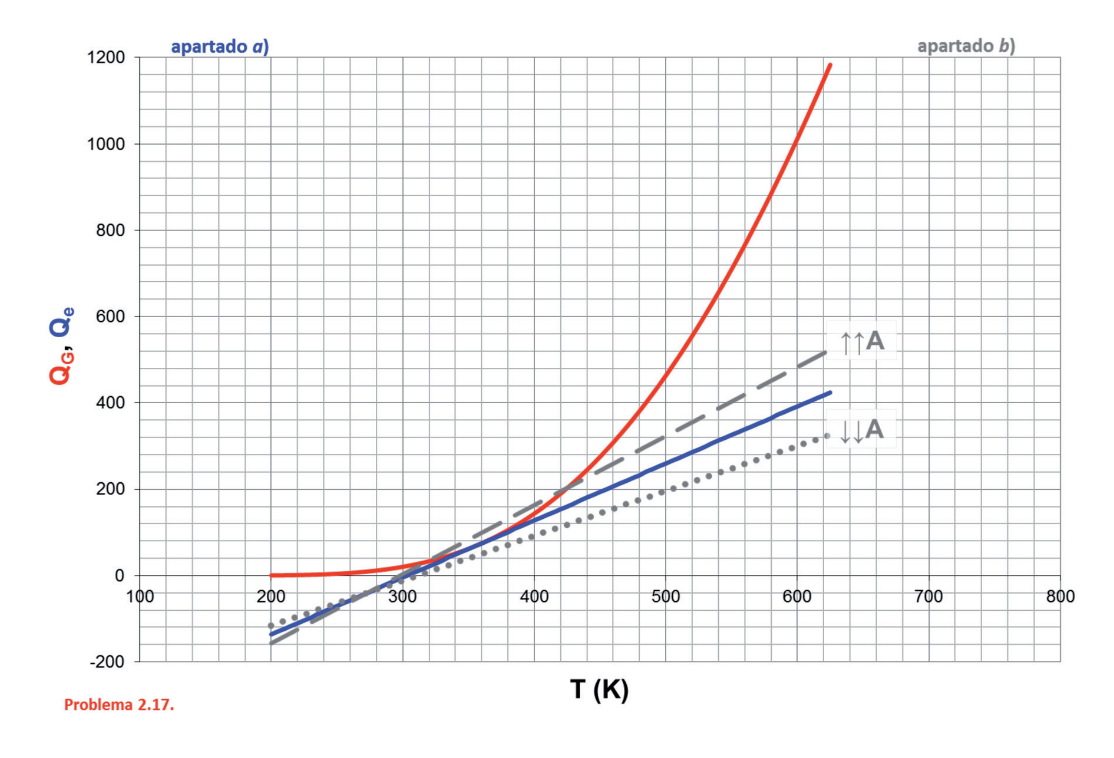


Figura 2.19. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$. Apartado *a* y apartado *b* (modificación del valor del área de transmisión de calor)

SOLUCIÓN: ***a)*** **X = 0.578**

b) **A = 8 m²**

c) **Si ↑↑ A → Se obtiene un único EE estable**

Si ↑↑A → No hay solución del sistema, luego no se produce la reacción

Problema 2.18. En un RCTA se han de desarrollar las reacciones elementales $A_1 \xrightarrow{k_1} A_2 \xrightarrow{k_2} A_3$.

Calcular gráficamente la temperatura de estado estacionario del reactor, el volumen del reactor y el área de intercambio de calor del serpentín, para alcanzar una conversión del 0.5 del A_1 alimentado y una relación c_{A2}/c_{A3}=10.

Datos y notas

x_{A0}= 1 ; Caudal volumétrico: 0.225 m³/s ; Caudal molar: 0.025 kmol/s.
Temperatura del alimento: 205 °C.
$A_1 = 5 \cdot 10^8$ s⁻¹; $A_2 = 1 \cdot 10^{11}$ s⁻¹; E_1 = 72106 kJ/kmol; E_2 = 97692 kJ/kmol.
ΔH_{01} = 34890 kJ/kmol ; ΔH_{02}= 46520 kJ/kmol.
Calor específico de todas las especies químicas: 105 kJ/kmol·K.
El fluido calefactor es vapor de agua saturado a 177 ºC.
Coeficiente global de transmisión de calor: 142 W/K·m².

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 2
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{j0} - c_j = \tau \cdot \sum_{i=1}^{2} \nu_{ij} \cdot r_i$

BALANCE DE ENERGÍA: $\kappa \cdot (T_{f_0} - T) = T - T_0 - \frac{\tau}{c_{k0}} \cdot \sum_{i=1}^{2} (-\nu_{ik}) \cdot r_i \cdot J_i$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \xrightarrow{k_1} A_2 \xrightarrow{k_2} A_3$

$$\frac{c_2}{c_3} = 10$$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_1^0 = 34890 \text{ kJ/kmol} \quad ; \quad \Delta H_2^0 = 46520 \text{ kJ/kmol}$$

$$\overline{C}_{p_1} = \overline{C}_{p_2} = \overline{C}_{p_3} = 105 \text{ kJ/kmol} \cdot \text{K}$$

CINÉTICA:

$$r_1 = k_1 \cdot c_1 \quad ; \quad r_2 = k_2 \cdot c_2$$

$$k_1 = A_1 \cdot \exp\left[-\frac{E_1}{R \cdot T}\right] \quad ; \quad A_1 = 5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1} \quad ; \quad E_1 = 72106 \text{ kJ/kmol} \cdot \text{K}$$

$$k_2 = A_2 \cdot \exp\left[-\frac{E_2}{R \cdot T}\right] \quad ; \quad A_2 = 1 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1} \quad ; \quad E_2 = 97692 \text{ kJ/kmol} \cdot \text{K}$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 205$ °C = 478 K	X = 0.5
$x_{10} = 1$	*a)* $T_{EE} = ?$
$Q_{v0} = 0.225$ m³/s	*b)* V = ?
$F_{10} = 0.025$ kmol/s	*c)* A = ?

INTERCAMBIADOR: $T_f = 177$ °C = 450 K = cte

$$U = 142 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K} \equiv 0.142 \text{ kJ/s} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}$$

RESULTADOS

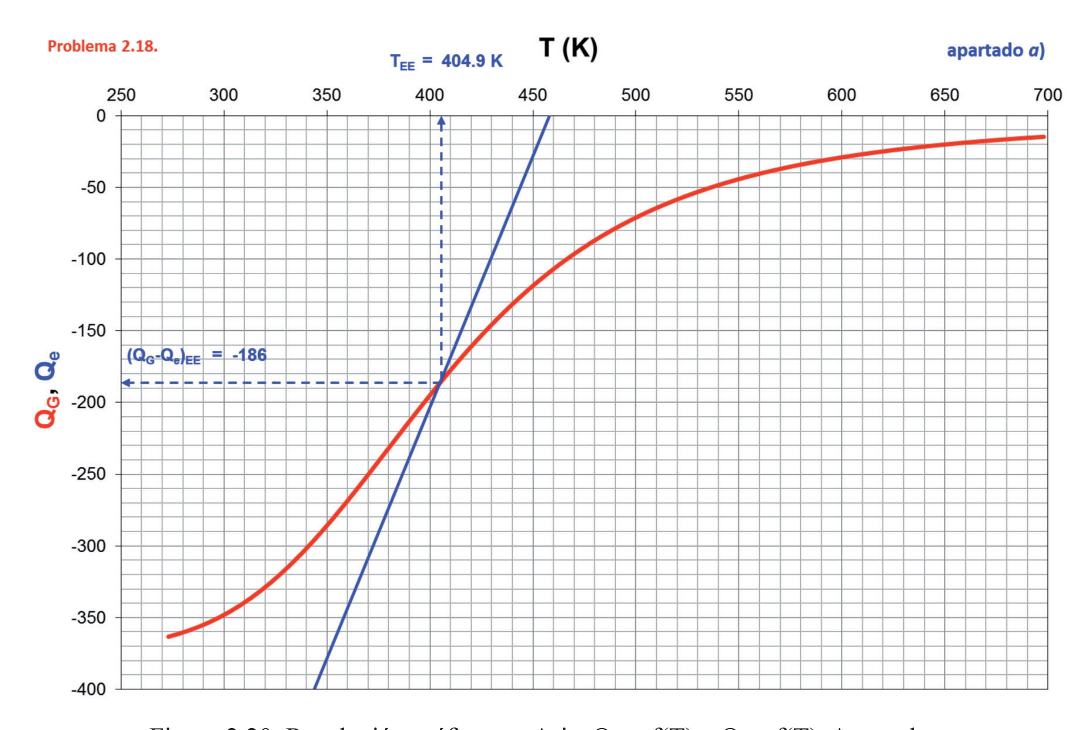


Figura 2.20. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$. Apartado *a*

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

Tabla 2.14. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Apartado	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
a)	EE	404.9	-186	0.5	ESTABLE

SOLUCIÓN: ***a)* T = 405 K**
***b)* V = 0.9 m³**
***c)* A = 46.4 m²**

Problema 2.19. En un RCTA se va a llevar a cabo la reacción en fase líquida $A_1(\ell) \leftrightarrow A_2(\ell)$. El alimento se introduce en el reactor a 375K, con un caudal molar de 0.0126 kmol/min y una concentración de 1.73 kmol de A_1/m^3. El volumen de reacción es de 0.667 m^3.

El reactor intercambia calor con los alrededores cuya temperatura puede oscilar entre 10, 20, 30 y 40 °C de invierno a verano. Calcular la influencia de la temperatura exterior sobre el grado de conversión obtenido y la máxima disminución que puede experimentar ese grado de conversión al pasar del invierno al verano.

Datos y notas

$$\Delta H_k^o = -83620 \text{ kJ/kmol} \quad ; \quad \theta_1 \cdot \overline{C}_{p1} = 41.81 \text{ kJ/kmol} \cdot K$$

$$r = k \cdot c_1 - k' \cdot c_2 = 3 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left[-\frac{15000}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot (1-X) - 5.44 \cdot 10^{23} \cdot \exp\left[-\frac{25050.5}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot X \quad \text{kmol/m}^3 \cdot \text{min}$$

$$U \cdot A = 2.09 \text{ kJ/min} \cdot K$$

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $J \cdot X = -(T_0 + \kappa \cdot T_{f_0}) + (1+\kappa) \cdot T$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \leftrightarrow A_2$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = -83620 \text{ kJ/kmol}$$

$$\theta_1 \cdot \overline{C}_{p_1} = 41.81 \text{ kJ/kmol} \cdot \text{K}$$

CINÉTICA:

$$r = k \cdot c_1 \quad - k' \cdot c_2$$

$$r = 3 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left[\frac{-15000}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot (1 - X) - 5.44 \cdot 10^{23} \cdot \exp\left[\frac{-25050.5}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot X \quad (\text{kmol/m}^3 \cdot \text{min})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 375$ K	$V = 0.667$ m^3
$F_{10} = 0.0126$ kmol/min	*a*) $X_{EE} = ?$
$c_{10} = 1.73$ kmol/m^3	*b*) $\Delta X = ?$

INTERCAMBIADOR: $T_{f_0} = 10, 20, 30 \text{ y } 40°\text{C} = 283, 293, 303 \text{ y } 313 \text{ K} = \text{cte}$

$$U \cdot A = 2.09 \text{ kJ/min} \cdot \text{K}$$

RESULTADOS

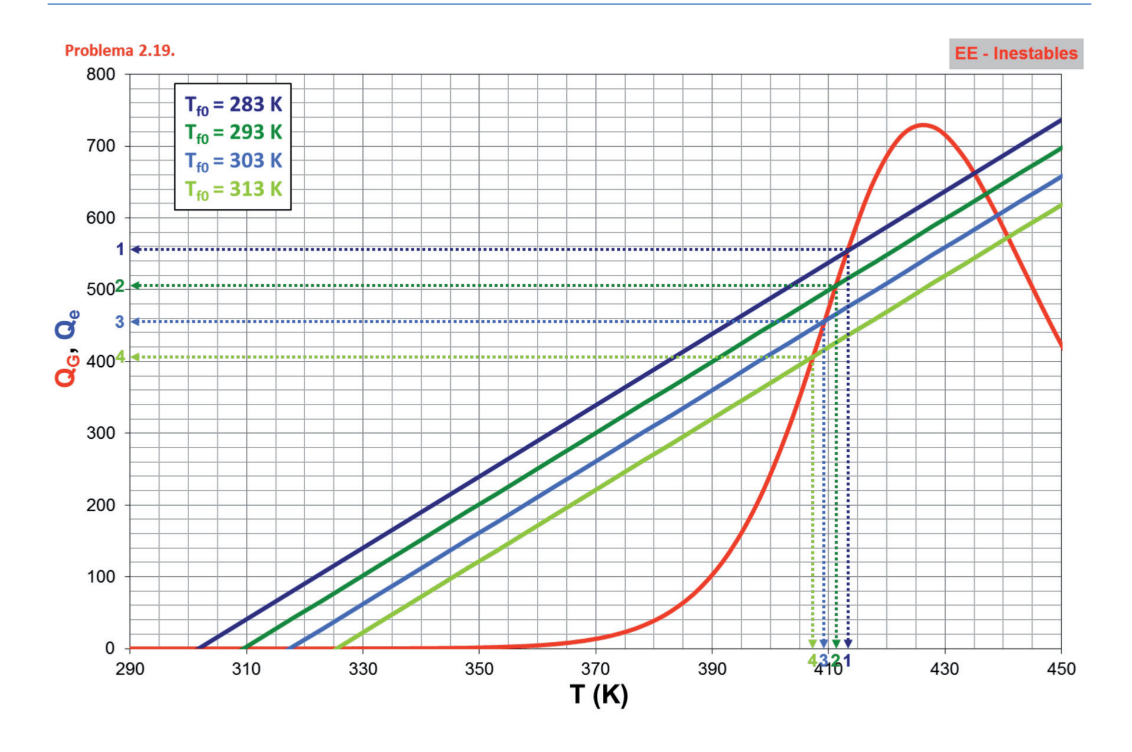


Figura 2.21. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$.
Estados Estacionarios INESTABLES

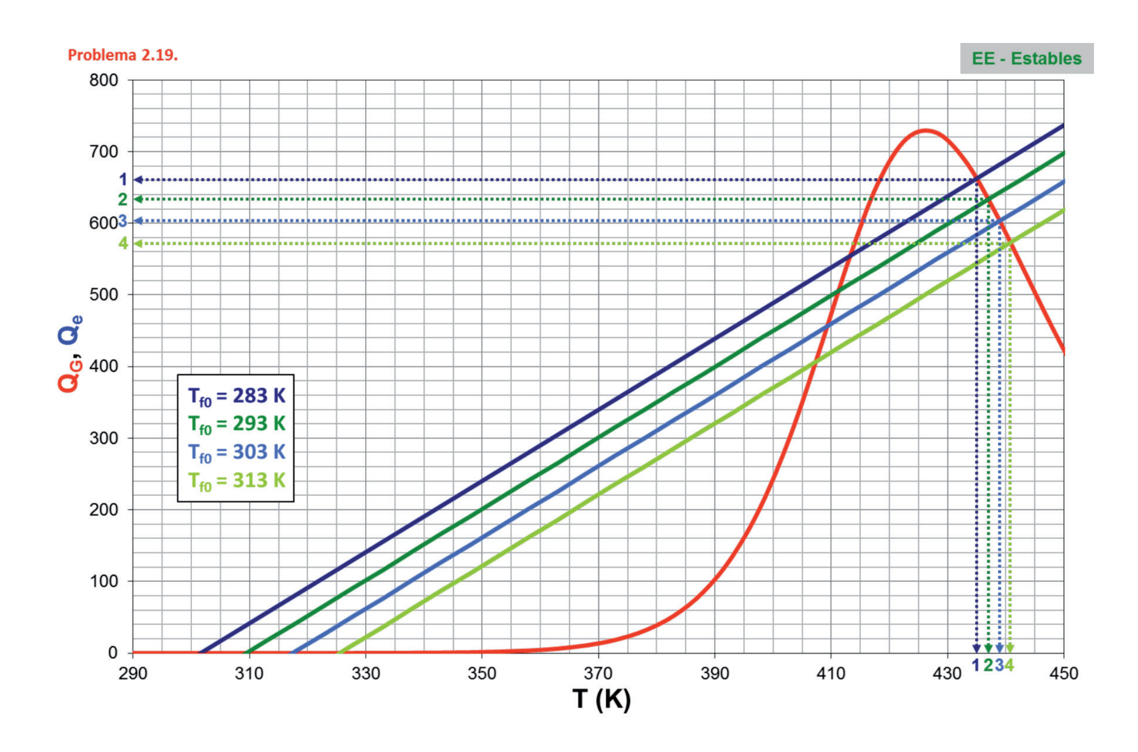


Figura 2.22. Resolución gráfica por Aris: $Q_G = f(T)$ y $Q_e = f(T)$.
Estados Estacionarios ESTABLES

Tabla 2.15. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

T_{f0} (K)	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
283	EE_1	413.4	556	0.278	INESTABLE
293	EE_2	411.3	506	0.253	INESTABLE
303	EE_3	409.2	455	0.228	INESTABLE
313	EE_4	407.3	406	0.203	INESTABLE
283	EE_1	435.0	663	0.332	ESTABLE
293	EE_2	437.0	633	0.317	ESTABLE
303	EE_3	438.9	603	0.302	ESTABLE
313	EE_4	440.8	573	0.287	ESTABLE

SOLUCIÓN: *a)* $T_{f0} = 283\ K \rightarrow X_{EE1} = 0.332$

$T_{f0} = 293\ K \rightarrow X_{EE2} = 0.317$

$T_{f0} = 303\ K \rightarrow X_{EE3} = 0.302$

$T_{f0} = 313\ K \rightarrow X_{EE4} = 0.287$

b) $(\Delta X)_{max} = 0.045$ → **variación del 14 %**

Problema 2.20. En un RCTA de 1 m^3 se va a realizar la reacción:
$A_1(\ell) \rightarrow \text{productos}(\ell)$. El caudal volumétrico del alimento puede oscilar entre los valores 0.1 l/min ≤ Q_{V0} ≤ 100 l/min. El RCTA intercambia calor con el aire que lo rodea, que se encuentra a 273K, siendo U · A = 257.3 J/min · K.

a) calcular la evolución de T_0, a la que se produce el encendido, con Q_{V0}. Determinar la pareja de valores (X,T) correspondientes a los estados estacionarios estable e inestable.
b) si T_0 = 320 K, obtener la variación de las temperaturas correspondientes a los estados estacionarios con Q_{V0}.

Datos y notas

$$c_{10} = 1 \text{ kmol} / m^3$$

$$\Delta H_k^o = -52300 \text{ kJ / kmol} \quad ; \quad \theta_1 \cdot \overline{C}_{p1} = 514.6 \quad \text{kJ / kmol} \cdot K$$

$$r = k \cdot c_1 = 7.1 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left[-\frac{13200}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot (1-X) \qquad \text{kmol / } m^3 \cdot \text{min}$$

REACTOR

TIPO: RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $J \cdot X = -(T_0 + \kappa \cdot T_{f_0}) + (1+\kappa) \cdot T \rightarrow \kappa \; (T_{f_0} = cte) = \dfrac{U \cdot A}{F_{k_0} \cdot \sum \theta_j \overline{C}_{p_j}}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = -52300 \text{ kJ/kmol } A_1$$

$$\theta_1 \cdot \overline{C}_{p_1} = 514.6 \text{ kJ/kmol} \cdot K$$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1$

$$r = 7.1 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left[\frac{-13200}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot (1-X) \quad (\text{kmol/m}^3 \cdot \text{min})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
0.1 l/min $\leq Q_{v0} \leq$ 100 l/min	V = 1 m^3 = 1000 l
T_0 = 320 K	*a*) $T_0 = f(Q_{vo})$ (encendido) X_{EE}, T_{EE} = ?
c_{10} = 1 kmol/m^3 = 0.001 kmol/l	*b*) $T_{EE} = f(Q_{v0})$ para T_0 = 320 K

INTERCAMBIADOR: $U \cdot A = 257.3 \text{ J/min} \cdot \text{K} \equiv 0.2573 \text{ kJ/min} \cdot \text{K}$

$T_{f_0} = 273 \text{ K} = \text{cte}$

RESULTADOS

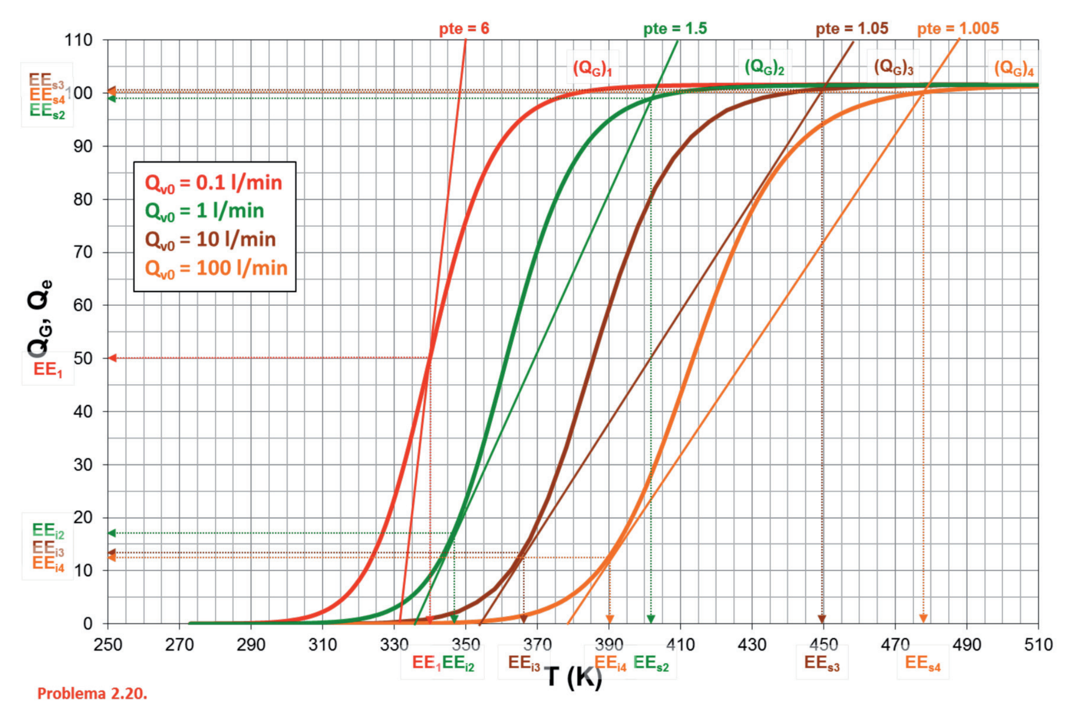


Figura 2.23. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Tabla 2.16. Estados estacionarios obtenidos en la resolución gráfica por Aris

Q_{v0} (l/min)	Estado Estacionario	T (K)	$Q_G = Q_e$ (K)	X	Estabilidad
0.1	EE_1	340	50.0	0.49	INESTABLE
1	EE_{i2}	346	17.0	0.17	INESTABLE
10	EE_{i3}	366	13.5	0.13	INESTABLE
100	EE_{i4}	390	12.5	0.12	INESTABLE
1	EE_{s2}	402	99.0	0.97	ESTABLE
10	EE_{s3}	449	101.0	0.99	ESTABLE
100	EE_{s4}	477	100.0	0.98	ESTABLE

SOLUCIÓN: *a*) Q_{v0} = 0.1 l/min → ninguno

Q_{v0} = 1 l/min → T_{EE} = 402 K y X_{EE} = 0.97

Q_{v0} = 10 l/min → T_{EE} = 449 K y X_{EE} = 0.99

Q_{v0} = 100 l/min → T_{EE} = 477 K y X_{EE} = 0.98

CAPÍTULO 3

Reactor discontinuo de tanque agitado (RDTA) intermedio y adiabático

Problema 3.01. Al estudiar la producción de aceites secantes por descomposición del aceite de ricino acetilado según el esquema de reacción:

$$\text{aceite ricino acetilado (l)} \rightarrow CH_3COOH\ (g) + \text{aceite secante (l)}$$

Gruummit y Flemming pudieron correlacionar los resultados experimentales suponiendo que la ecuación de velocidad era de la forma $r = k \cdot c_1$, en el intervalo de temperaturas comprendido entre 568 y 613 K, siendo la energía de activación de 186277 kJ/kmol y el factor preexponencial $1.937 \cdot 10^{15}$ min^{-1}.

Si se utiliza un RDTA adiabático para obtener una producción de aceite secante de 500 kg/h, cuya temperatura inicial es de 613 K y los tiempos de carga, descarga y limpieza suman 50 minutos, calcular:

a) El tiempo de reacción necesario para alcanzar un grado de conversión de 0.6 construyendo previamente la curva X-t.

b) El volumen de reacción para obtener la producción media fijada.

Datos y notas

La descomposición completa de 1 kg de aceite de ricino acetilado originaría 0.156 kg de ácido acético.
La densidad de la mezcla de reacción es de 900 kg/m^3.

$$\Delta H_k^o = 62790 \text{ kJ / kmol}$$

El calor específico medio molar es 966 kJ/kmol · K.

REACTOR

TIPO: RDTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $dt = c_{k_0} \cdot \frac{dX}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $dT = J \cdot dX \;;\; T = T_0 + J \cdot X$

REACCIÓN

ESQUEMA: aceite ricino acetilado (l) $\rightarrow$ CH_3COOH (g) + aceite secante (l)

$A_1 \text{ (l)} \rightarrow A_2 \text{ (g)} + A_3 \text{ (l)}$

$\rho_m = 900 \text{ kg/m}^3$

$1\text{kg } A_1 \xrightarrow{X=1} 0.156\text{kg } A_2$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = 62790 \text{ kJ/kmol}$

$\overline{C}_{p_m} = 966 \text{ kJ/kmol} \cdot \text{K}$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1$

$A = 1.937 \cdot 10^{15} \text{min}^{-1}$

$E = 186277 \text{ kJ/kmol}$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 613$ K	$m_3 = 500$ kg/h
	t' = 50 min
	X = 0.6
	a) t = ?, ¿X = f(t)?, *b)* V = ?

RESULTADOS

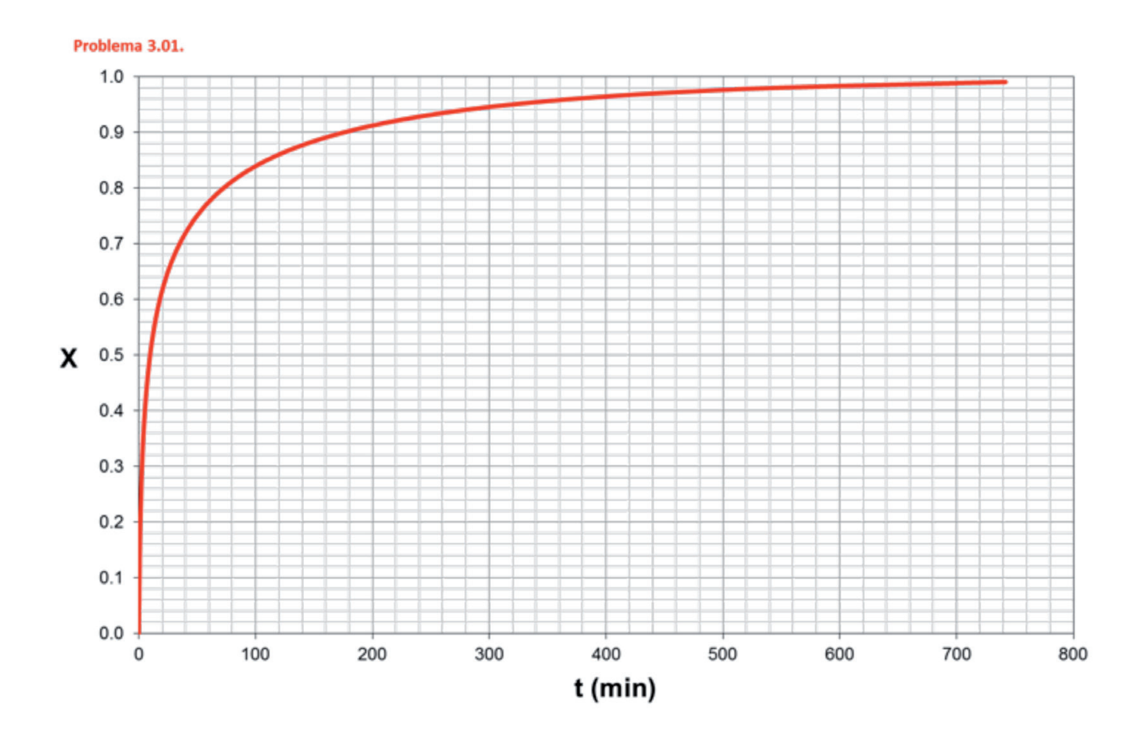


Figura 3.1. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción: X = f(t)

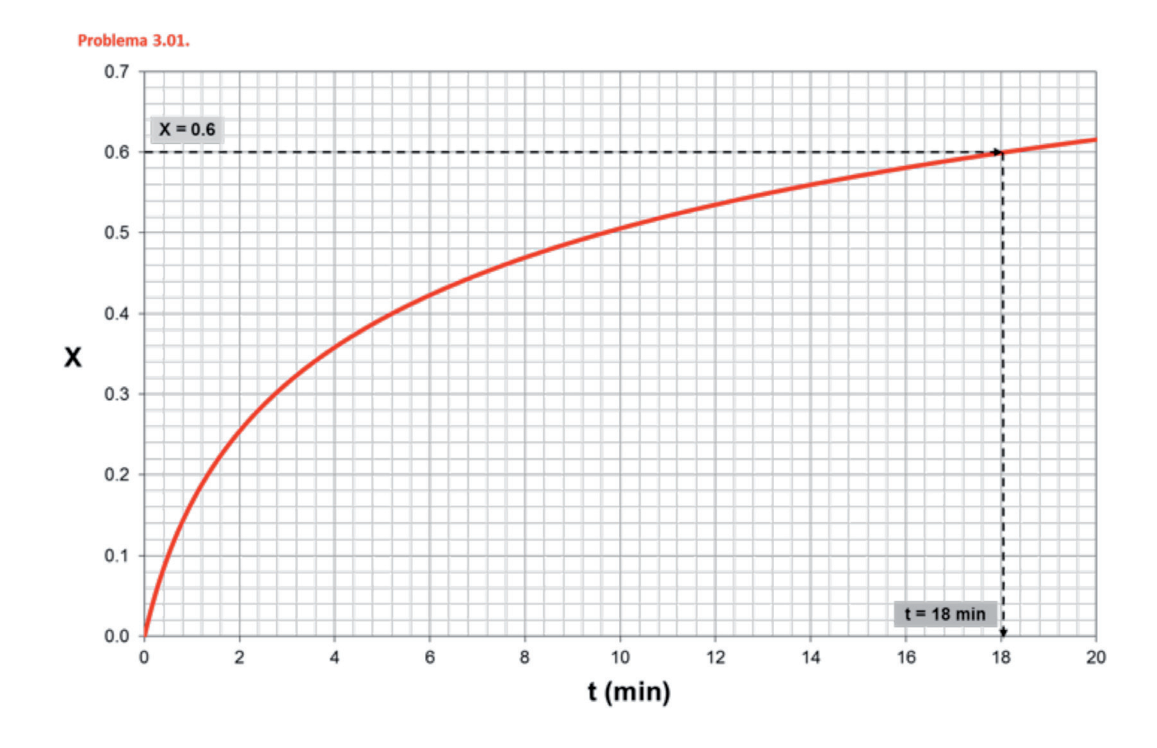


Figura 3.2. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción: X = f(t)

SOLUCIÓN: ***a*) t = 18 min**

***b*) V = 1.25 m^3**

Problema 3.02. Para fabricar aceites secantes se hidroliza aceite de ricino acetilado en un RDTA según el esquema de reacción:

$$\text{aceite ricino acetilado (l)} \rightarrow CH_3COOH\ (g) + \text{aceite secante (l)}$$

Si en cada ciclo de operación se cargan en el reactor 277 kg de aceite de ricino acetilado y la temperatura inicial de 613 K, calcular:

a) La potencia que habrá que suministrar a la mezcla reactante, mediante calentadores eléctricos sumergidos, para que se alcance un grado de conversión de 0.7 para un tiempo de reacción de 20 minutos.
b) La superficie de transmisión de calor si la máxima diferencia de temperatura permisible entre la superficie de los calentadores y la mezcla de reacción es de 150 K y el coeficiente global de transmisión de calor (referido al área externa de los calentadores) vale 340 J/s · m^2 · K.

Datos y notas

En el problema 01 puede encontrarse la información complementaria necesaria para resolver este problema.
El peso molecular del aceite de ricino acetilado es 385 kg/kmol.

REACTOR

TIPO: RDTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{q\cdot A}{N_{k_0}\cdot \sum\theta_j \cdot \bar{C}_{p_j}} \cdot \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$, donde $Q^* = q \cdot A$

BALANCE DE ENERGÍA INTERCAMBIADOR: $Q^* = U\cdot A\cdot (T_f - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: aceite ricino acetilado (l) $\rightarrow CH_3COOH\ (g) +$ aceite secante (l)

$$A_1\ (l) \rightarrow A_2\ (g) + A_3\ (l)$$

$$\rho_m = 900\ kg/m^3$$

$$M_1 = 385 kg/kmol$$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = 62790 \text{ kJ/kmol}$$
$$\overline{C}_{p_m} = 966 \text{ kJ/kmol} \cdot \text{K}$$
$$J = -65\text{K}$$

CINÉTICA: $$r = 1.937 \cdot 10^{15} \cdot \exp\left[\frac{-22405}{T}\right] \cdot c_{10} \cdot (1-X)$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 613$ K	$V = 1.236$ m^3
$m_{10} = 277$ kg	$X = 0.7$
	$t = 20$ min
	a) $Q^* = ?$ y *b)* $A = ?$

INTERCAMBIADOR: $T_f - T = 150$ K
$U = 340 \text{ J/s} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}$

RESULTADOS

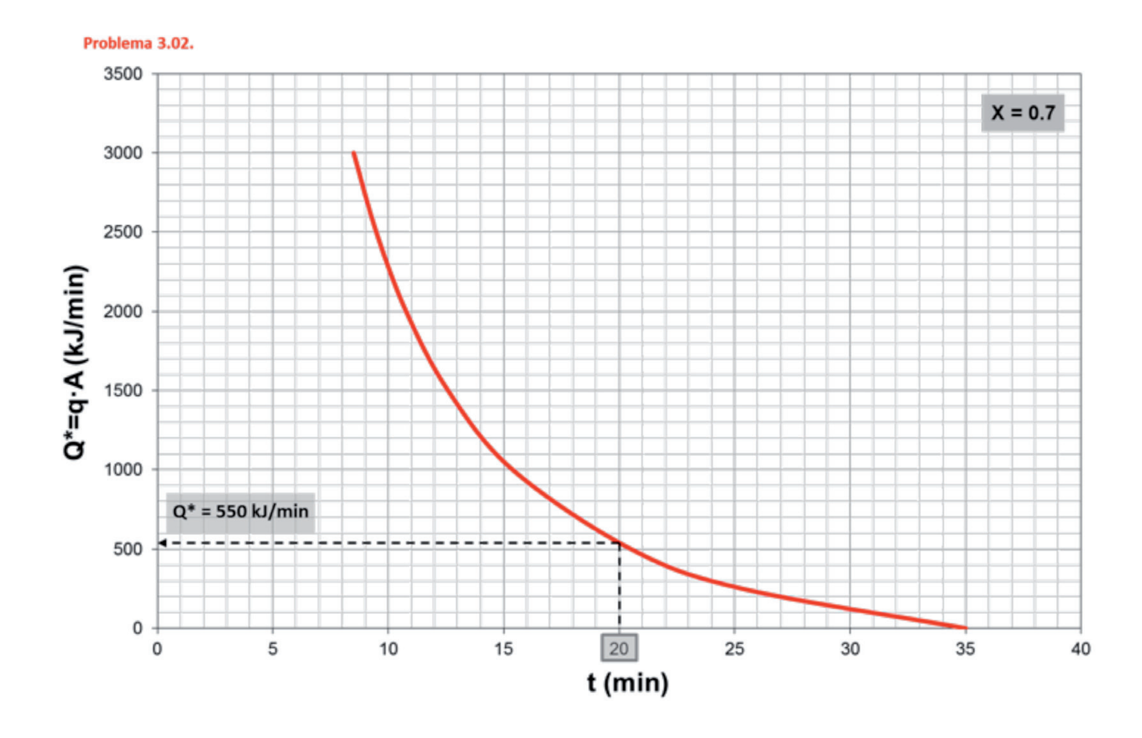


Figura 3.3. Evolución de la potencia que habrá que suministrar a la mezcla reactante, mediante calentadores eléctricos, con el tiempo de reacción: Q* = f(t)

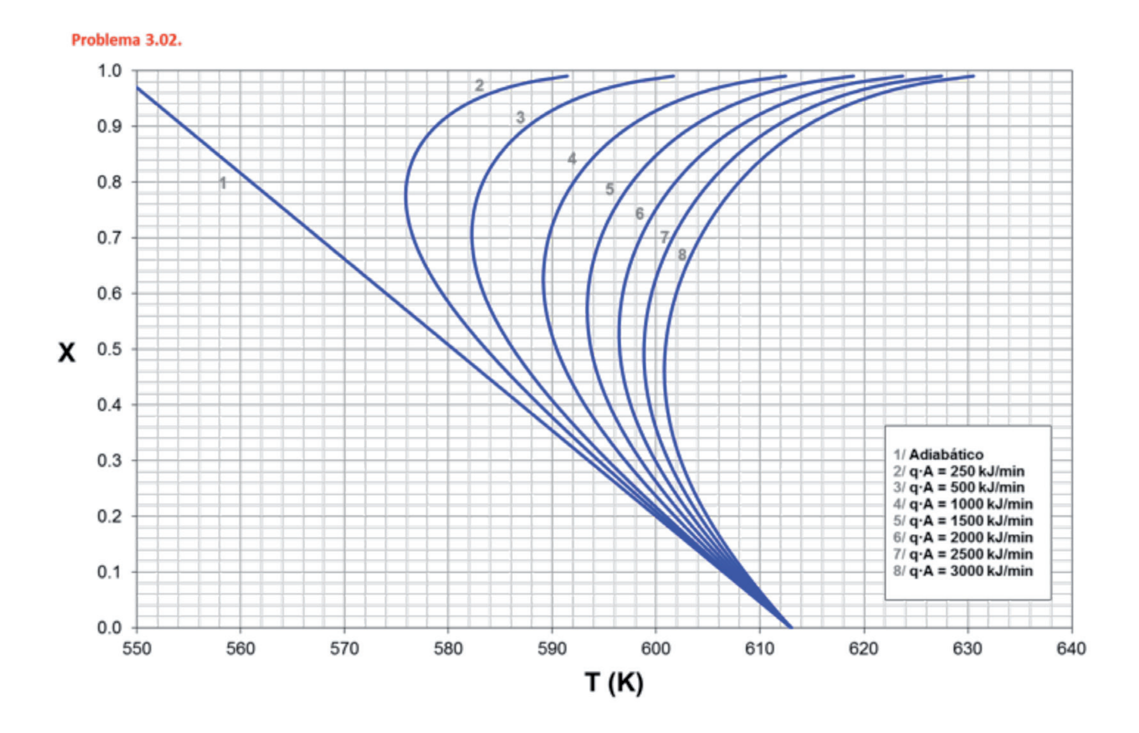


Figura 3.4. Evolución del grado de conversión con la temperatura del reactor: X = f(T)

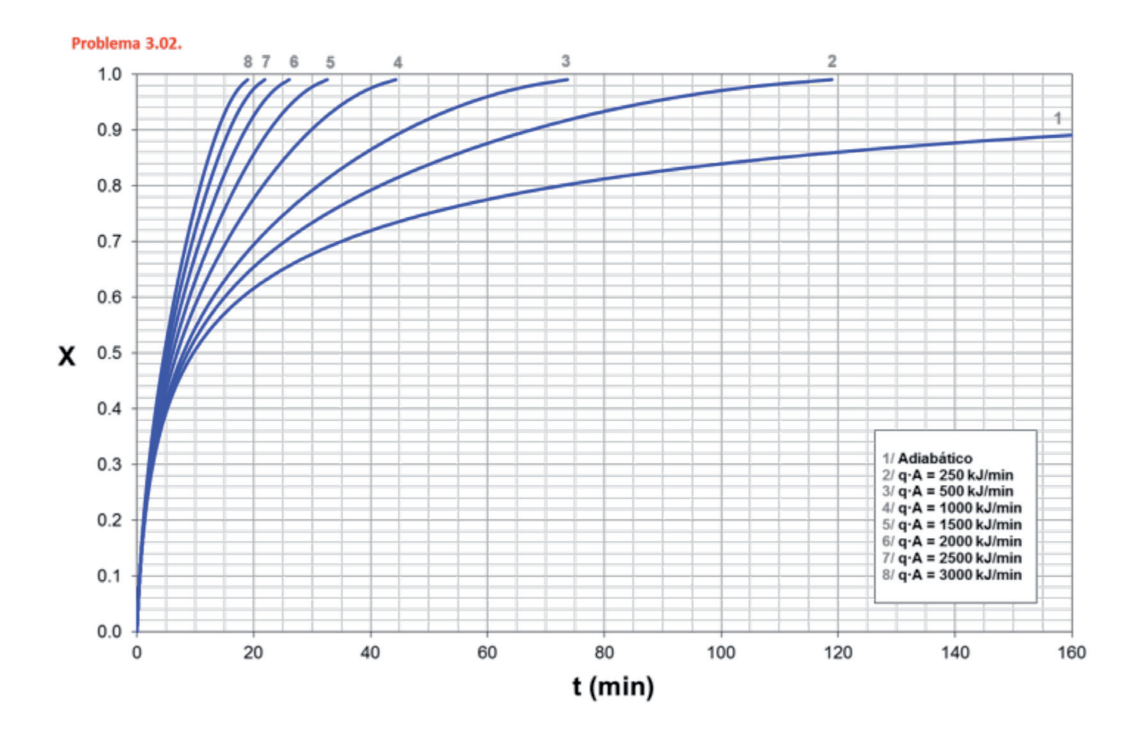


Figura 3.5. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción: X = f(t)

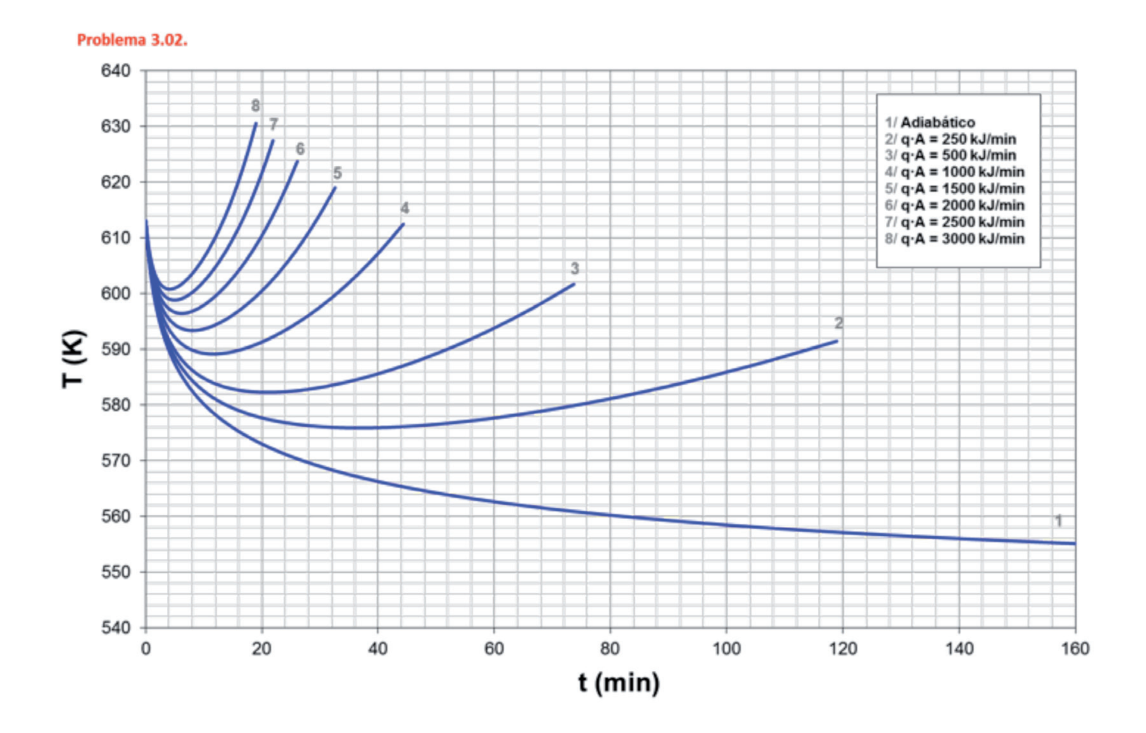


Figura 3.6. Evolución de la temperatura de reacción con el tiempo de reacción: T = f(t)

SOLUCIÓN:	***a*) Q* = 550 kJ/min ≡ 9.2 kJ/s**
	***b*) A = 0.18 m²**

Problema 3.03. Un RDTA de 2 m^3 se carga con 50 kmol en total a 450 K para desarrollar la reacción irreversible en fase líquida $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$, en presencia de un inerte A_4. La composición de la mezcla inicial es x_{10}= 0.4, x_{20}= 0.4, x_{30}= 0.1 y x_{40}= 0.1.

El calor de reacción a 560 K es $\Delta H_k^o = 10050\ kJ / kmol\ A_1$, y los calores específicos molares de las especies químicas presentes son C_{p1}= 41.8 kJ/kmol · K, C_{p2}= 33.5 kJ/kmol · K, C_{p3}= 50.2 kJ/kmol · K y C_{p4}= 25.1 kJ/kmol · K.

La cinética es de primer orden parcial respecto a cada uno de los reactivos (de segundo orden total). Experimentalmente se ha determinado los valores siguientes para la constante de velocidad:

T (K)	350	400
k (m^3/kmol·h)	0.06	0.36

Para calentar el sistema de reacción se utiliza vapor Dowtherm que puede condensar a 200 o 250 °C.

a) Las curvas T = f(t), X = f(t) y T = f(X) para valores de U · A comprendidos entre 0 (adiabático) y 7 kJ/s · K y para valores de X comprendidos entre 0 y 0.9.

b) A partir de las gráficas anteriores escoger el valor del producto U · A que permite realizar la reacción con una desviación mínima de 20 K con respecto a la temperatura inicial y con un tiempo de reacción mínimo, para alcanzar un grado de conversión de 0.8.

c) Proyectar el reactor sabiendo que el coeficiente individual de transmisión de calor del lado de la mezcla reactiva puede oscilar a voluntad (modificando la velocidad del agitador) entre 418.6 y 1046.5 kJ/h · m^2 · K.

Datos y notas

El sistema puede considerarse de densidad constante.
La conductividad térmica de la pared del reactor es k = 155 kJ/h · m · K y su espesor es de 3 mm.
El coeficiente individual de transmisión de calor del vapor Dowtherm que condensa vale:

T (K)	473	523
h_v (kJ/h·m²·K)	31400	24500

REACTOR

TIPO: RDTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{q \cdot A}{N_{k_0} \cdot \sum \theta_j \cdot \overline{C}_{p_j}} \cdot \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$, donde Q* = q · A

BALANCE DE ENERGÍA INTERCAMBIADOR: $Q^* = U \cdot A \cdot (T_f - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \xrightarrow{A_4} A_3$

$\rho = cte$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = 10050$ kJ/kmol A_1 (a 560 K)

$\overline{C}_{p_1} = 41.8$ kJ/kmol·K

$\overline{C}_{p_2} = 33.5$ kJ/kmol·K

$\overline{C}_{p_3} = 50.2$ kJ/kmol·K

$\overline{C}_{p_4} = 25.1$ kJ/kmol·K

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 \cdot c_2$

T (K)	350	400
k (m³/kmol·h)	0.06	0.36

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 450$ K	$V = 2$ m³
$N_{t0} = 50$ kmol	*a*) ¿X = f(T), X = f(t) y T = f(t)?, siendo 0<U·A<7 kJ/s·K y 0<X<0.9
$x_{10} = x_{20} = 0.4$ y $x_{30} = x_{40} = 0.1$	*b*) Para X = 0.8 y $t = t_{min}$ → U·A = ? , siendo T_0-20K<T<T_0+20K
	c) A = ?, siendo 418.6<h_i<1046.5 kJ/h·m²·K

INTERCAMBIADOR: $k = 155$ kJ/h·m·K

$l = 3$ mm

T (K)	473	523
h_v (kJ/h·m²·K)	31400	24500

RESULTADOS

Tabla 3.1. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

T (K)	k (m³/kmol·h)	1/T (K⁻¹)	ln k (m³/kmol·h)
350	0.06	0.0029	-2.8134
400	0.36	0.0025	-1.0217

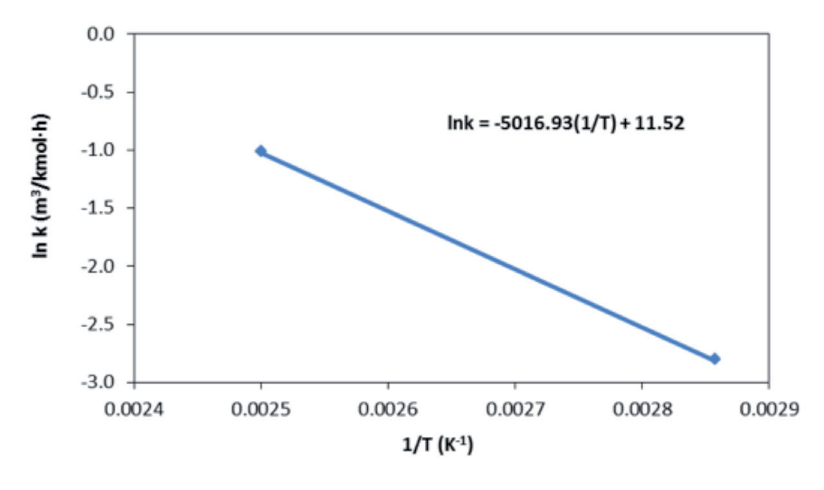


Figura 3.7. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

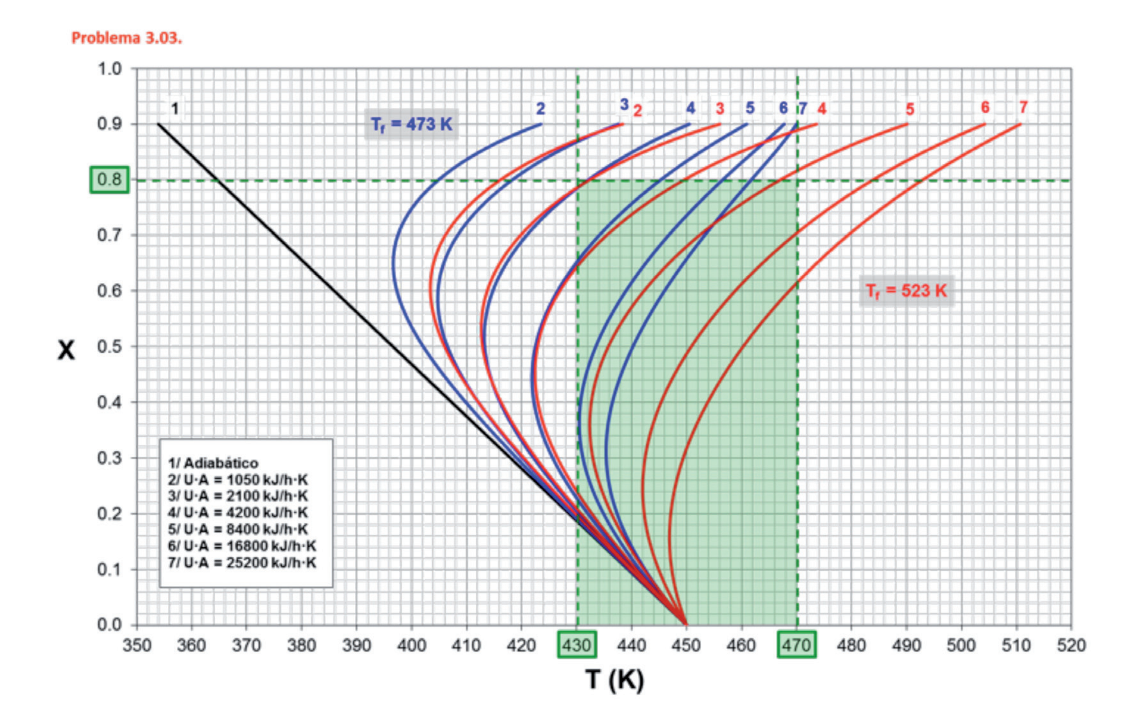


Figura 3.8. Evolución del grado de conversión con la temperatura del reactor: X = f(T)

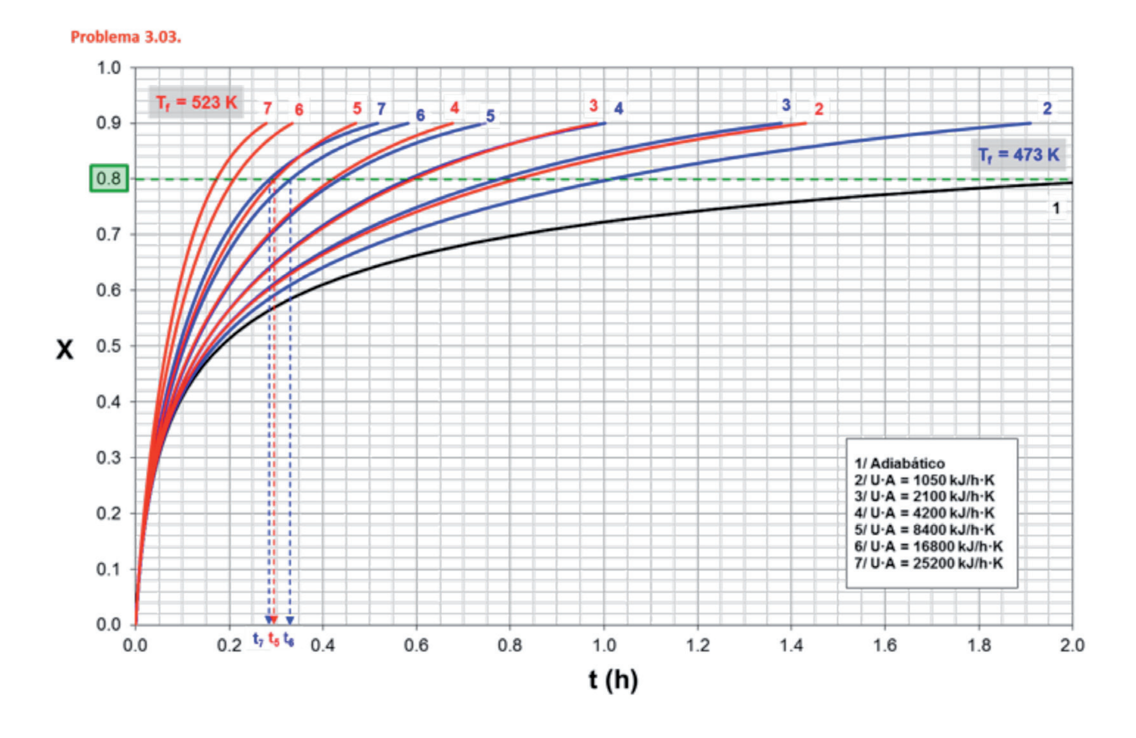


Figura 3.9. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción: X = f(t)

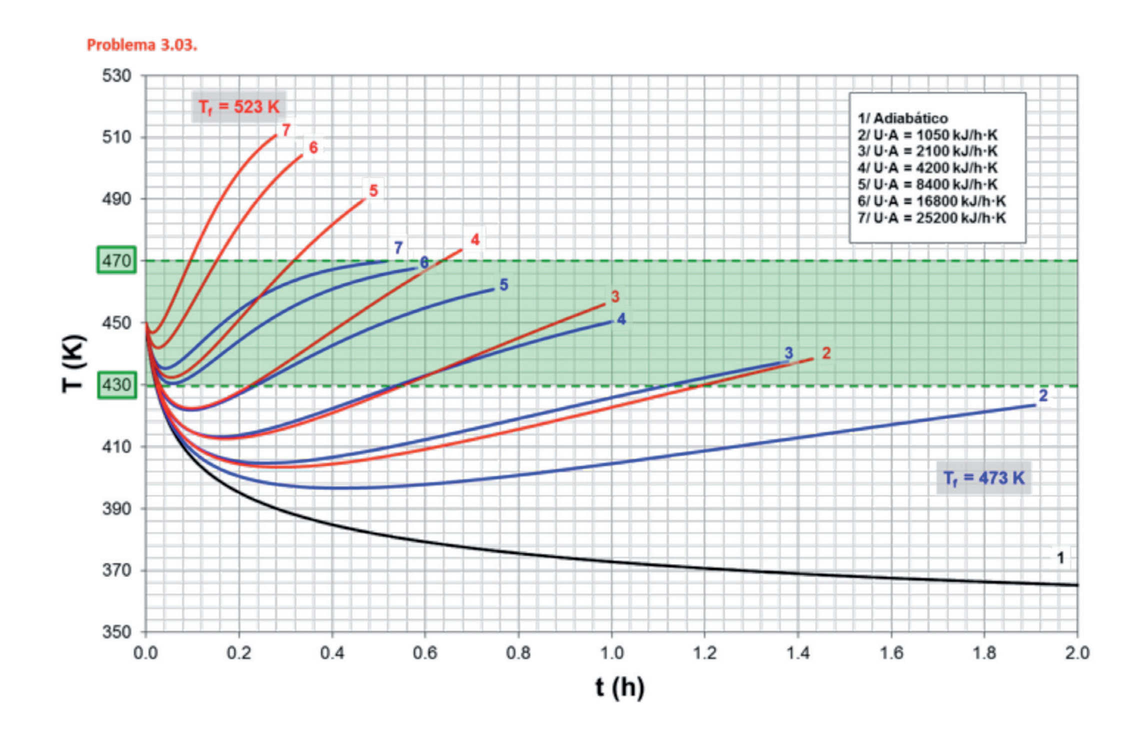


Figura 3.10. Evolución de la temperatura de reacción con el tiempo de reacción: T = f(t)

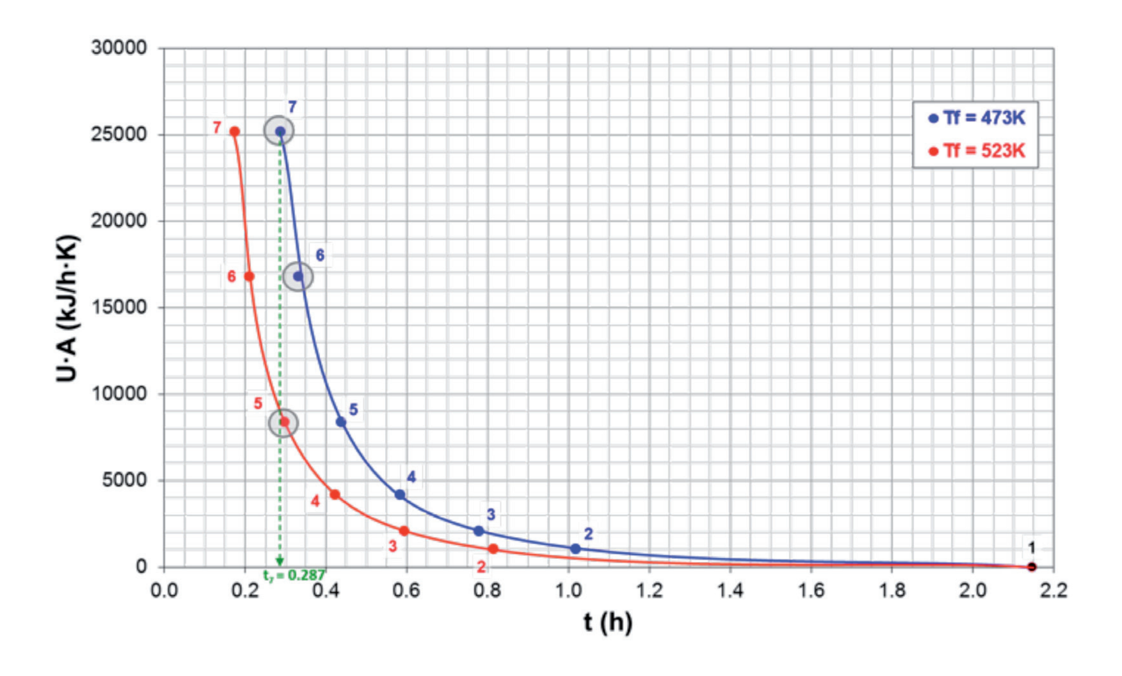


Figura 3.11. Evolución de la potencia que habrá que suministrar a la mezcla reactante, mediante calentadores eléctricos, con el tiempo de reacción: U·A = f(t)

Tabla 3.2. Resultados obtenidos para las temperaturas del fluido intercambiador de 473 y 523 K (valores azules y rojos, respectivamente)

T_f (K)		U·A (kJ/h·K)	X	t (h)	$T = T_{max}$ (K)	T_0 (K)	T_{min} (K)	$\Delta T_{superior}$	$\Delta T_{inferior}$	
	1	0	0.8	2.146	364.6					
	2	1050	0.8	1.017	404.9	450	396.6	–45	–53	**NO**
	3	2100	0.8	0.778	418.3	450	404.7	–32	–45	**NO**
473	4	4200	0.8	0.583	432.1	450	413.2	–18	–37	**NO**
	5	8400	0.8	0.436	445.3	450	421.9	–5	–28	**NO**
	6	16800	0.8	**0.332**	456.6	450	430.5	7	–20	**SÍ**
	7	25200	0.8	**0.287**	461.8	450	435.3	12	–15	**SÍ**
	1	0	0.8	2.146	364.6					
	2	1050	0.8	0.814	416.2	450	403.4	–34	–47	**NO**
	3	2100	0.8	0.593	432.4	450	412.6	–18	–37	**NO**
523	4	4200	0.8	0.422	449.6	450	422.4	0	–28	**NO**
	5	8400	0.8	**0.297**	467.1	450	432.4	17	–18	**SÍ**
	6	16800	0.8	0.210	483.9	450	442.0	34	–8	**NO**
	7	25200	0.8	0.173	493.0	450	446.9	43	–3	**NO**

SOLUCIÓN: ***a)*** **X = f(T), X = f(t) y T = f(t) (ver figuras 3.8, 3.9 y 3.10)**

b) **T_f = 473 K, U·A = 25200kJ/h·K, t = 17.2 min**

c) **A = 25.4 m² (para T_f = 473 K y h_i = 1046.5 kJ/h·m²·K)**

Problema 3.04. Se desea fabricar hexametilentetramina (HMT), en un reactor semicontinuo de tanque agitado, adicionando una cantidad acuosa de amoniaco (25 % en peso de NH_3) con un caudal volumétrico de 0.454 m³/h, a una carga inicial de 0.90 m³ (a 25 °C) de una solución acuosa de formaldehido (42 % en peso de HCHO). La temperatura inicial de la solución de formaldehido se eleva a 50°C para comenzar la reacción. La temperatura de la disolución de NH_3 que se introduce continuamente es de 25 °C.

Puede admitirse que el calor desprendido durante la reacción, que tiene lugar en fase líquida, es independiente de la temperatura y la concentración y su valor es 2230 kJ/kg de HMT.

Si el reactor opera a 100 °C la velocidad de reacción es muy rápida (prácticamente instantánea). No es aconsejable que el reactor opere a temperaturas superiores a los 100 °C para evitar la vaporización del agua con el consiguiente aumento de la presión (el reactor está herméticamente cerrado).

Se propone enfriar el reactor mediante serpentines por cuyo interior circula agua. El coeficiente global de trasmisión de calor entre la mezcla reactante y el agua de refrigeración vale 482.6 J/s · m^2 · K. La velocidad de circulación del agua de refrigeración a través de los serpentines es tal que su temperatura apena varía, por lo que puede tomarse un valor medio de 25 °C.

Calcular el área de transmisión de calor y la duración de la primera etapa de reacción (régimen transitorio).

Datos y notas

La velocidad de reacción inversa es despreciable, por lo que el esquema de reacción es:

$$4NH_3 + 6HCHO \rightarrow N_4(CH_2)_6 + 6H_2O$$

Densidad de la solución amoniacal 910 kg/m^3; densidad de la solución de formaldehido 1100 kg/m^3.

Calor específico de la mezcla reactante 75.3 kJ/kmol·K (constante e independiente de la composición).

Calor específico de la disolución acuosa de amoniaco 75.3 kJ/kmol·K.

El reactor funciona del modo siguiente durante cada ciclo de operación:

a) En una primera etapa, y para que la mezcla de reacción alcance rápidamente la temperatura a que se desea tenga lugar la reacción (100 °C), se cortará el paso de agua de refrigeración.

b) Durante la segunda etapa la reacción se desarrollará a la temperatura constante de 100 °C.

REACTOR

TIPO: RSCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_j - c_{j_0} + \tau \cdot \frac{dc_j}{dt} = \nu_j \cdot r \cdot \tau$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR:

$$\sum_{j=1}^{S} F_{j_0} \bar{C}_{p_j} \cdot (T - T_0) + \sum_{j=1}^{S} N_j \bar{C}_{p_j} \cdot \frac{dT}{dt} = Q^* + \nu_k \cdot r \cdot V \cdot \Delta H_k^0$$

BALANCE DE ENERGÍA INTERCAMBIADOR: $Q^* = U \cdot A \cdot (T_f - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $4A_1 + 6A_2 \rightarrow A_3 + 6A_4$

$M_1(NH_3) = 17$ kg/kmol

$M_2(HCHO) = 30$ kg/kmol

$M_3(N_4(CH_2)_6) = 140$ kg/kmol

$M_4(H_2O) = 18$ kg/kmol

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

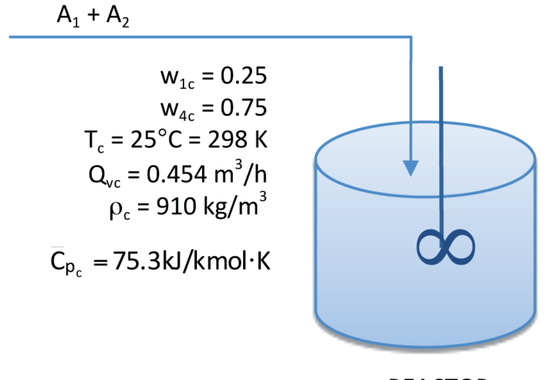
$\Delta H_k^0 = -2230$ kJ/kg A_3

CINÉTICA: Reacción instantánea

DATOS Y NOTAS

INTERCAMBIADOR: $U = 482.6\ J/s \cdot m^2 \cdot K$

$T_f = 25°C = 298\ K = cte$



REACTOR (inicio)
$V_o = 0.90\ m^3$
$w_{2R} = 0.42$
$w_{4R} = 0.58$
$T_{R0} = 50\ °C = 323$ K
$\rho_R = 1100\ kg/m^3$
$\bar{C}p_R = 75.3$ kJ/kmol·K

REACTOR
T= 100°C = 373 K

a) t_a = ?
b) A = ?

RESULTADOS

SOLUCIÓN: ***a)*** **$t_a = 0.49\ h = 29.5\ min$**
b) **$A = 2.63\ m^2$**

Problema 3.05. Se desea hidrolizar anhídrido acético en un reactor semicontinuo de tanque agitado isotermo en el que inicialmente se introducen 0.01 m^3 de una solución acuosa que contiene $0.5 \cdot 10^{-4}$ kmol de anhídrido acético por cada metro cúbico de la misma. En una operación típica se conecta el agitador, una vez se ha introducido la carga inicial, y se calienta el reactor hasta que la mezcla alcanza la temperatura de reacción de 313 K. A continuación comienza a introducirse en el reactor una corriente de una disolución acuosa de anhídrido acético (cuya concentración es $3 \cdot 10^{-4}$ kmol de anhídrido por metro cúbico) con un caudal volumétrico de 0.12 m^3/h, mientras que se drena una corriente de producto de igual caudal volumétrico.

Si la reacción es irreversible y de primer orden respecto al anhídrido acético, calcular la concentración de dicho componente y de ácido acético en la disolución que sale del reactor al cabo de 3 minutos de reacción y al cabo de un tiempo de reacción infinito.

Datos y notas

Admítase que la densidad de la mezcla de reacción permanece constante durante toda la operación.

A la temperatura de reacción la constante de velocidad vale $6.33 \cdot 10^{-3}$ s^{-1}.

Supóngase que la reacción está prácticamente congelada hasta el momento en que comienza a introducirse la disolución de anhídrido acético en el reactor.

REACTOR

TIPO: RSCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{j_0} - c_j + \nu_j \cdot r \cdot \tau = \tau \cdot \frac{dc_j}{dt}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR:

$$\sum_{j=1}^{S} F_{j_0} \overline{C}_{p_j} \cdot (T - T_0) + \sum_{j=1}^{S} N_j \overline{C}_{p_j} \cdot \frac{dT}{dt} = Q^* + \nu_k \cdot r \cdot V \cdot \Delta H_k^0$$

REACCIÓN

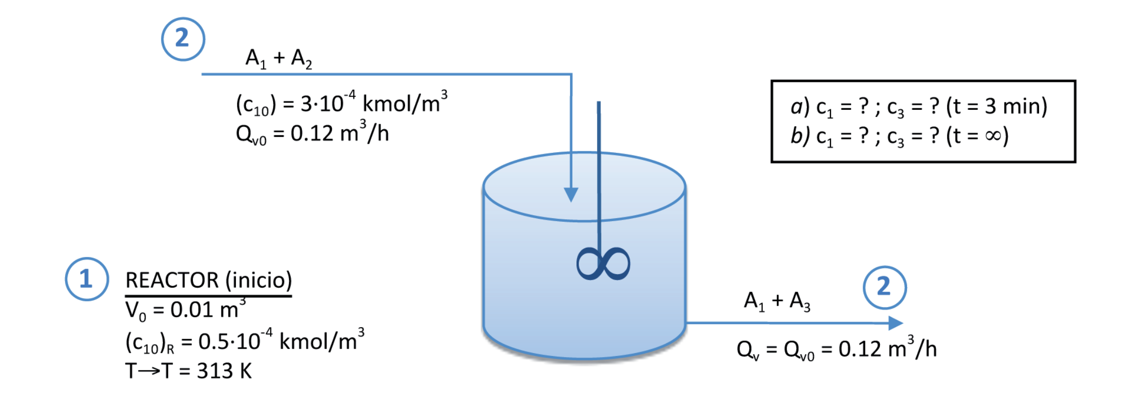
ESQUEMA: $(CH_3CO)_2O + H_2O \rightarrow 2CH_3COOH$

$A_1 \; + \; A_2 \; \rightarrow 2A_3$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 = 6.33 \cdot 10^{-3} \cdot c_1$

$c_1 = f(t)$

DATOS Y NOTAS



RESULTADOS

SOLUCIÓN: ***a)*** **$c_1 = 9.41 \cdot 10^{-5}$ kmol/m³ ; $c_3 = 1.37 \cdot 10^{-4}$ kmol/m³**

b) **$c_1 = 1.04 \cdot 10^{-4}$ kmol/m³ ; $c_3 = 3.93 \cdot 10^{-4}$ kmol/m³**

Problema 3.06. Para estudiar la cinética de una reacción química en fase líquida, a escala de laboratorio, es frecuente la práctica de sumergir el reactor en un baño de agua a temperatura uniforme, con objeto de que la temperatura de reacción varíe lo menos posible a lo largo del experimento. Se dispone de un montaje de este tipo consistente en un RDTA de 0.4 litros de volumen, sumergido en un baño de agua cuya temperatura se mantendrá constante e igual a 20 °C durante el experimento. En dicho reactor se va a desarrollar la reacción irreversible en fase líquida de polimerización del estireno, en presencia del catalizador adecuado, según el esquema $A_1 \rightarrow A_2$.

La ecuación de velocidad es $r = k \cdot c^{1/2} \cdot c_1$, donde c_1 es la concentración de estireno en la solución bencénica y c la concentración de catalizador (a las condiciones de operación puede admitirse que permanece constante e igual a 0.01 mol/l para cualquier valor del tiempo de reacción). La variación de la constante de velocidad con la temperatura es $k = 2.321 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left(\frac{-7356.07}{T}\right) \quad (\ell / mol)^{1/2} \cdot min^{-1}$.

Si la superficie de intercambio de calor entre el reactor y el baño de agua es de 0.0322 m^2, la temperatura inicial de la mezcla de reacción es de 20 °C y la concentración inicial de estireno es de 2 kmol/m^3:

a) Calcular la variación de la temperatura de la mezcla de reacción con el grado de conversión, hasta el valor de 0.6.
b) Calcular el tiempo necesario para alcanzar la conversión del 0.6.

Datos y notas

El coeficiente global medio de transmisión de calor vale 142 J/s · m^2 · K.
El calor de reacción medio en el intervalo de temperaturas considerado es –69.5 kJ/mol.
Puede tomarse para la capacidad calorífica media de la mezcla de reacción, en el intervalo de temperaturas de operación, el valor de 183 J/mol de A_1 · K.

REACTOR

TIPO: RDTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{U \cdot A \cdot (T_f - T)}{N_{k_0} \cdot \sum \theta_j \cdot \overline{C}_{p_j}} \cdot \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA INTERCAMBIADOR: $Q^* = U \cdot A \cdot (T_f - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \xrightarrow{A_3} A_2$

$c_{10} = 2 \text{ kmol/m}^3$

$c_{30} = 0.01 \text{ mol/l} \equiv 0.01 \text{ kmol/m}^3 = \text{cte}$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = -69.5 \text{ kJ/mol} \equiv -69500 \text{ kJ/kmol}$

$\overline{C}_{p_m} = 183 \text{ J/mol } A_1 \cdot K \equiv 183 \text{ kJ/kmol } A_1 \cdot K$

CINÉTICA:

$$r = k \cdot c_3^{1/2} \cdot c_1$$

$$k = 2.321 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left[\frac{-7356.07}{T}\right] \quad [(l(/mol)^{1/2} \cdot min^{-1}] \equiv [(m^3(/kmol)^{1/2} \cdot min^{-1}]$$

$$r = 2.321 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left[\frac{-7356.07}{T}\right] \cdot c_3^{1/2} \cdot c_1$$

DATOS Y NOTAS

REACTOR
$V = 0.4\ l = 0.4 \cdot 10^{-3}\ m^3$
$T_0 = 20°C = 293\ K$
$X = 0.6$
a) ¿T = f(X)?
b) t = ?, para X = 0.6

INTERCAMBIADOR: $U = 142\ J/s \cdot m^2 \cdot K \equiv 8.52\ kJ/min \cdot m^2 \cdot K$

$T_f = 20°C = 293\ K = cte$

$A = 0.0322\ m^2$

RESULTADOS

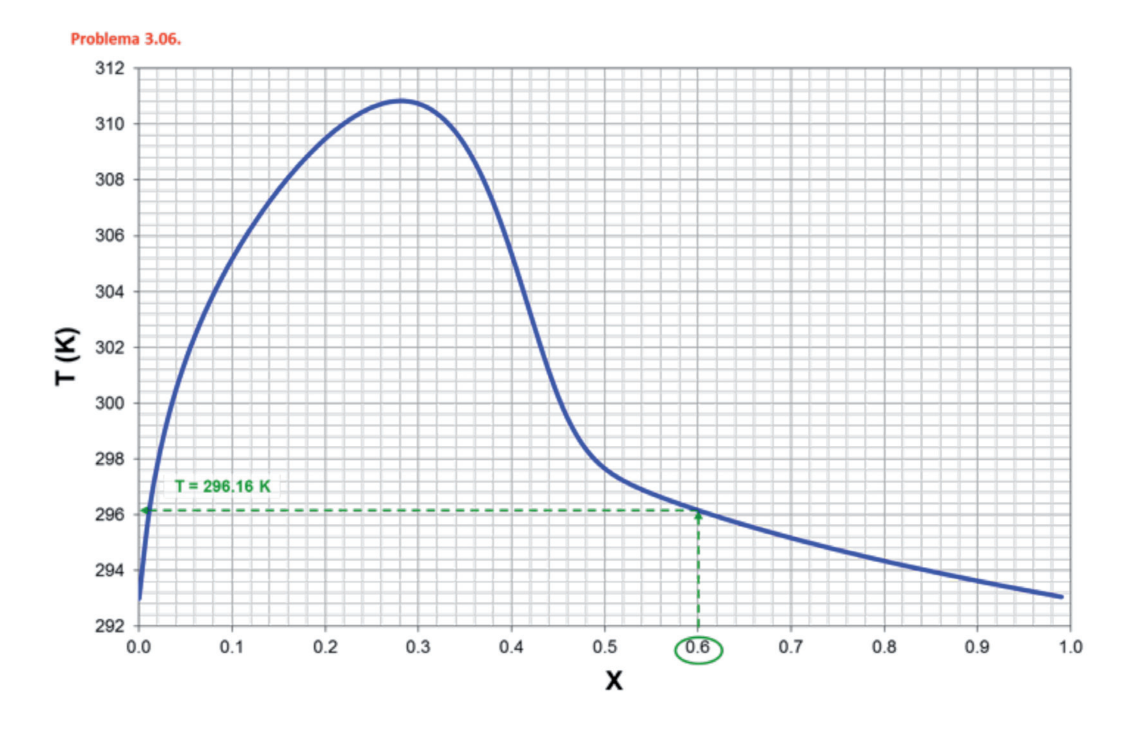


Figura 3.12. Evolución la temperatura del reactor con el grado de conversión: T = f(X)

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

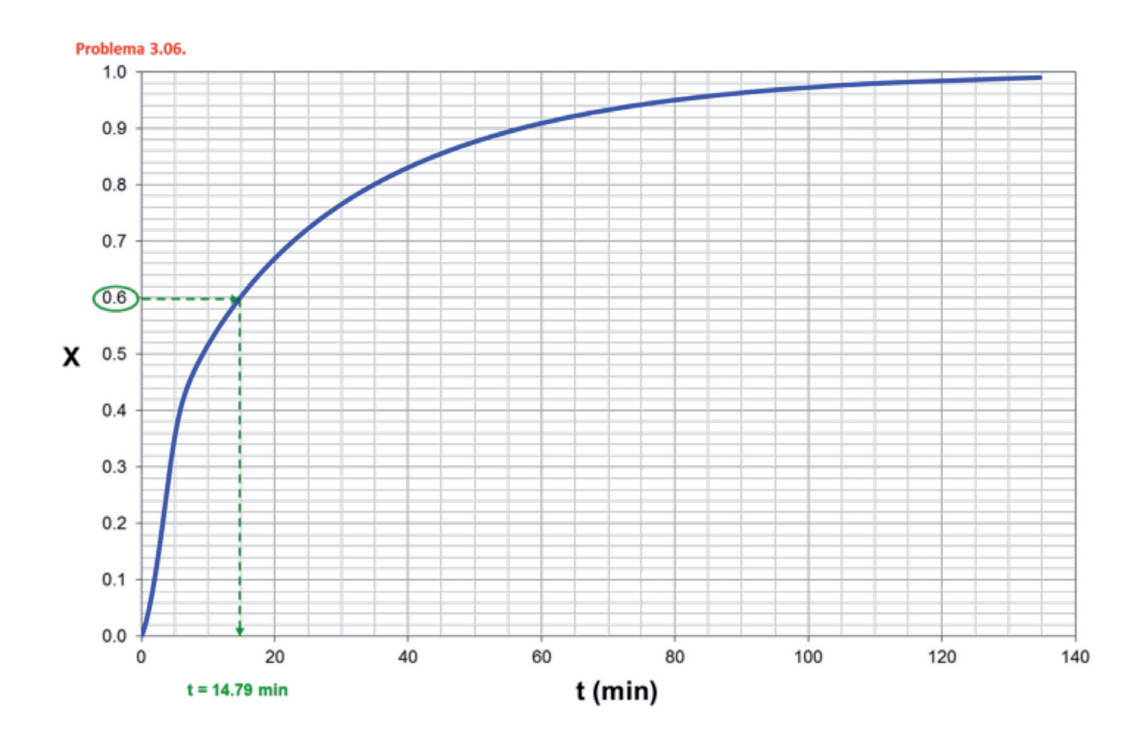


Figura 3.13. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción: X = f(t)

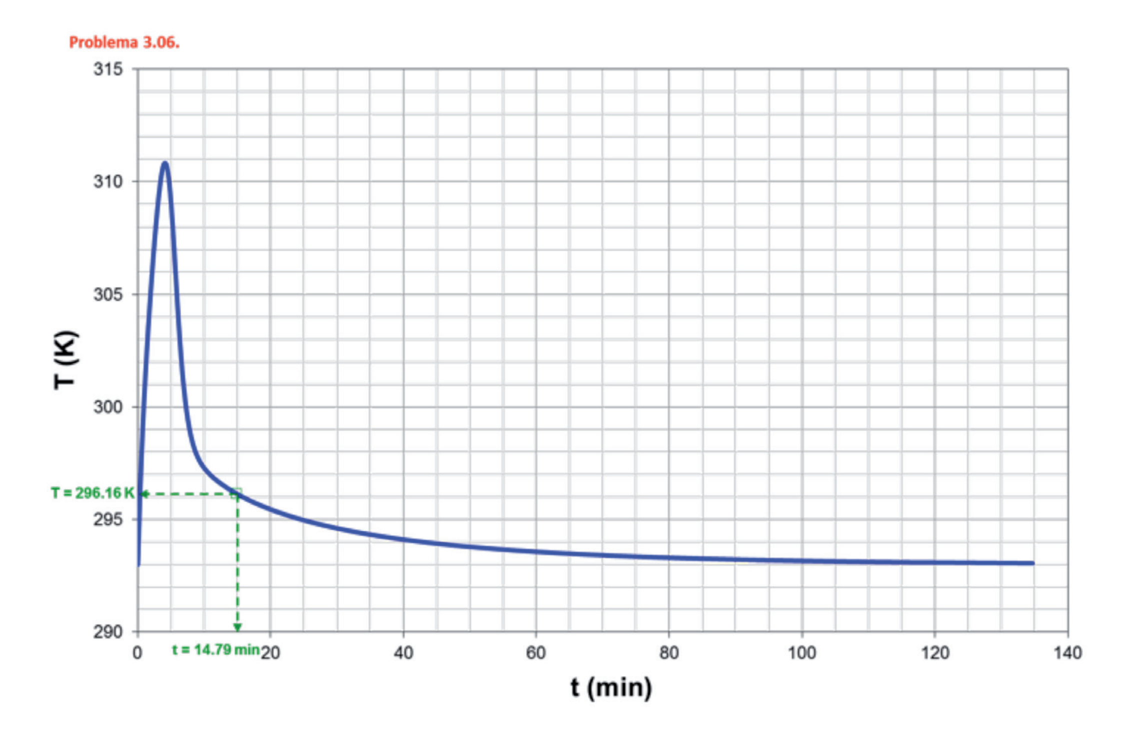


Figura 3.14. Evolución de la temperatura con el tiempo de reacción: T = f(t)

SOLUCIÓN: ***a)*** **T = f(X)**

b) **t = 14.8 min**

Problema 3.07. Se quiere desarrollar la reacción irreversible en fase líquida $A_1 \rightarrow A_2$ en un RDTA de 5 m^3 de volumen. La velocidad de reacción varía con la temperatura en la forma $k = 4 \cdot 10^6 \cdot \exp\left(\frac{-7900}{T}\right) \quad s^{-1}$

La temperatura inicial de la mezcla de reacción es de 20 °C y la máxima temperatura de reacción permisible es de 95 °C. El reactor va provisto de un intercambiado de calor de 3.3 m^2 de área que puede operar con vapor de agua saturado (T_f= 120 °C y U = 1360 J/s · m^2 · K) o con agua fría (T_f= 15 °C y U = 1180 J/s · m^2 · K).

El tiempo requerido para llenar y vaciar el reactor es de 10 y 15 minutos respectivamente, no requiriéndose el limpiado del mismo.

Si la mezcla inicial consiste en A_1 puro, se desea obtener un grado de conversión igual o mayor a 0.9 y el reactor opera en cada ciclo con la siguiente secuencia de etapas:

1.º se precalienta la mezcla inicial hasta 55 °C utilizando el dispositivo de calefacción,
2.º a partir de ese momento el reactor funciona adiabáticamente,
3.º cuando la temperatura de la mezcla de reacción llega a 95 °C, o el grado de conversión a 0.9, se enfría la mezcla de reacción hasta 45 °C utilizando el dispositivo refrigerante.

Calcular:

a) El tiempo de reacción y el tiempo total del ciclo de reacción en el caso hipotético de que la reacción solo tenga lugar durante la etapa 2.ª.
b) Caso de que la reacción se iniciara en el momento de introducir la mezcla en el reactor (a 20 °C) desarrollándose durante la etapa 1.ª de precalentamiento, así como durante la etapa 2.ª, prosiguiendo durante la etapa 3.ª de enfriamiento, deducir las ecuaciones diferenciales que, adecuadamente integradas entre los límites que se indicará, permitirían calcular la variación de T y X con el tiempo de reacción durante las etapas de precalentamiento y enfriamiento. Sustituir en dichas ecuaciones todas las magnitudes que se conozcan de modo que queden en función solo de X, T y t.

Datos y notas

Considérese $\Delta H_1^o = -1670 \text{ kJ/kg} \quad ; \quad \rho_m \cdot \overline{C}_P = 4.2 \cdot 10^6 \quad \text{J/m}^3 \cdot \text{K}$, constantes e independientes de la composición, siendo ρ_m la densidad molar de la mezcla de reacción.
c_{10} = 1kmol/m^3; M_1 =100kg/kmol

REACTOR

TIPO: RDTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{U \cdot A \cdot (T_f - T)}{N_{k_0} \cdot \sum \theta_j \cdot \overline{C}p_j} \cdot \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA INTERCAMBIADOR: $Q^* = U \cdot A \cdot (T_f - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

$c_{10} = 1 \text{ kmol/m}^3$

$M_1 = 100 \text{ kg/kmol}$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = -1670 \text{ kJ/kg} = -167000 \text{ kJ/kmol}$

$\rho_m \cdot \overline{C}p_m = 4.2 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3 \cdot K \equiv 4200 \text{ kJ/m}^3 \cdot K$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 = k \cdot c_{10} \cdot (1 - X)$

$k = 4 \cdot 10^6 \cdot \exp\left[\frac{-7900}{T}\right] \quad (s^{-1})$

DATOS Y NOTAS

REACTOR
$V = 5 \text{ m}^3$, $x_{10} = 1$
$T_0 = 20°C = 293$ K, $T^* = 95°C = 368$ K
$X \geq 0.9$
a) t = ? y t_T = ? (reacción solo etapa 2.ª)
b) ¿dt/dX y dT/dX? (reacción en las 3 etapas)

INTERCAMBIADOR:

$$A = 3.3\ m^2 \begin{cases} \text{Calienta} \rightarrow T_f = 120\ ^\circ C = 393\ K = cte \quad ; \quad U = 1360\ J/s \cdot m^2 \cdot K\ \equiv 1.36\ kJ/s \cdot m^2 \cdot K \\ \text{Enfría} \rightarrow T_f = 15\ ^\circ C = 288\ K = cte \quad ; \quad U = 1180\ J/s \cdot m^2 \cdot K\ \equiv 1.18\ kJ/s \cdot m^2 \cdot K \end{cases}$$

ETAPAS: **1ª)** $T_0 \xrightarrow{\text{calentamiento}} T = 55°C = 328\ K$

2ª) Adibático ($Q^* = 0$)

3ª) Cuando $T = 95°C = 368\ K$ ó $X = 0.9 \xrightarrow{\text{enfriamiento}} T = 45\ °C = 318\ K$

RESULTADOS

Apartado *b*)

→ 1.ª Etapa

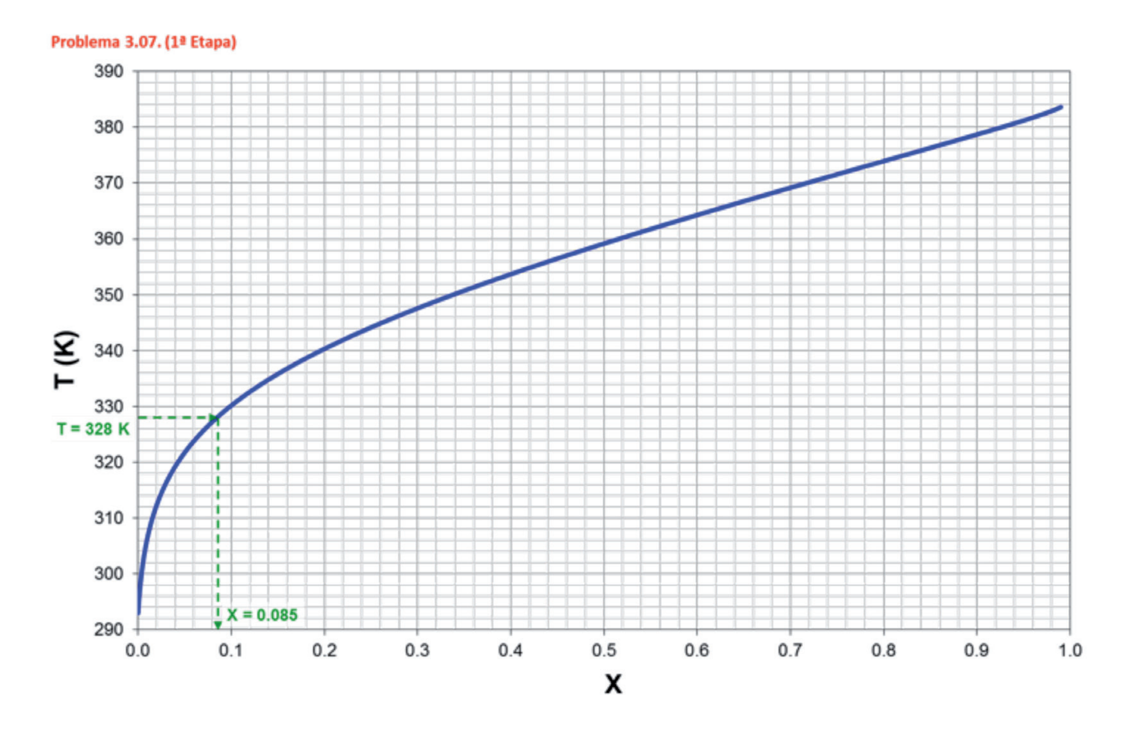


Figura 3.15. Evolución de la temperatura del reactor con el grado de conversión, T = f(X), durante la 1.ª etapa

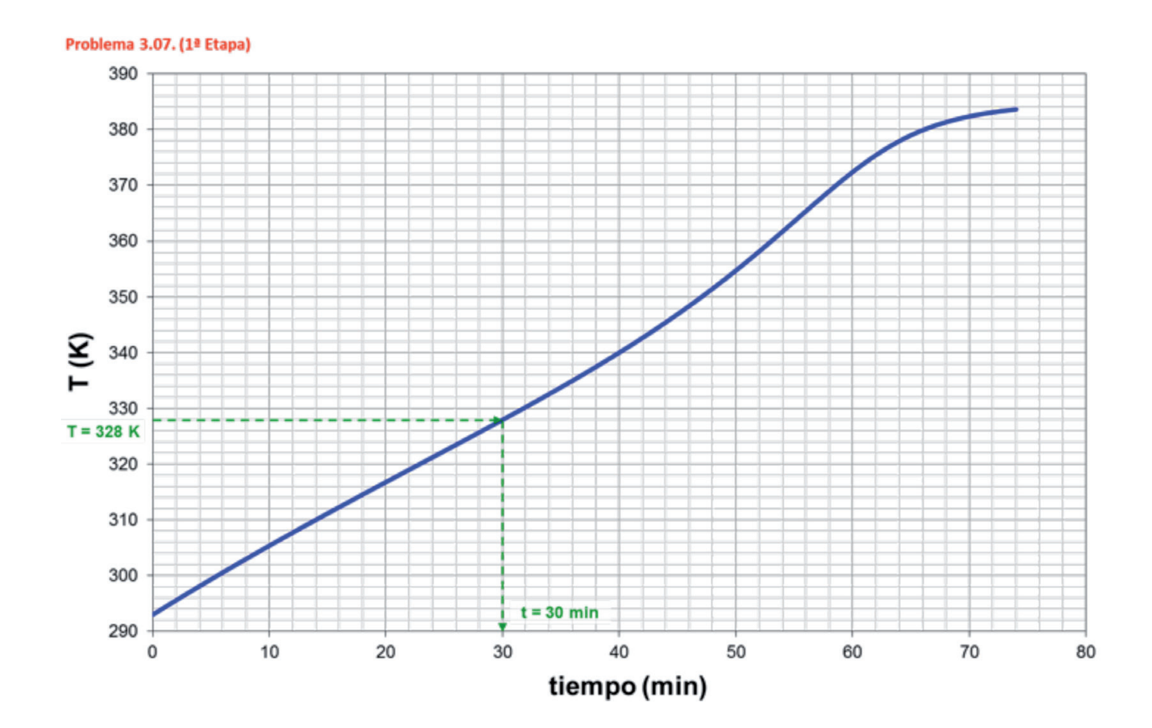


Figura 3.16. Evolución de la temperatura con el tiempo de reacción, T = f(t), durante la 1.ª etapa

→ 2.ª Etapa

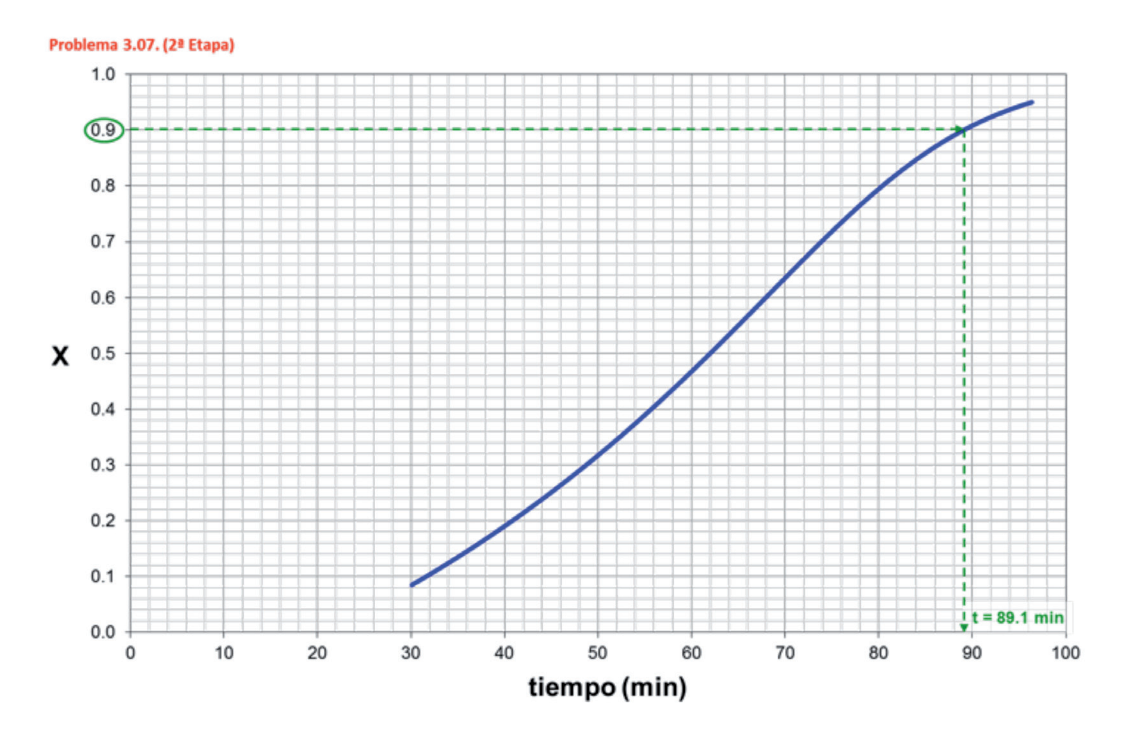


Figura 3.17. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción, X = f(t), para la 2.ª etapa

→ 3ª Etapa

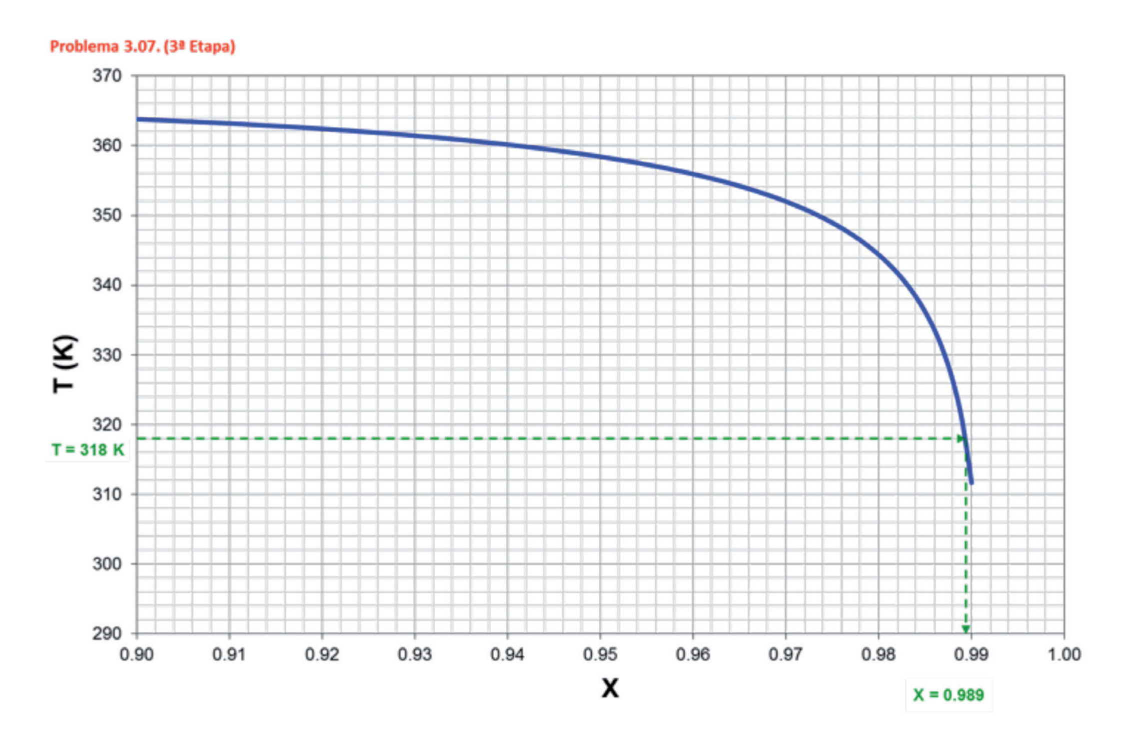


Figura 3.18. Evolución de la temperatura del reactor con el grado de conversión, T = f(X), durante la 3.ª etapa

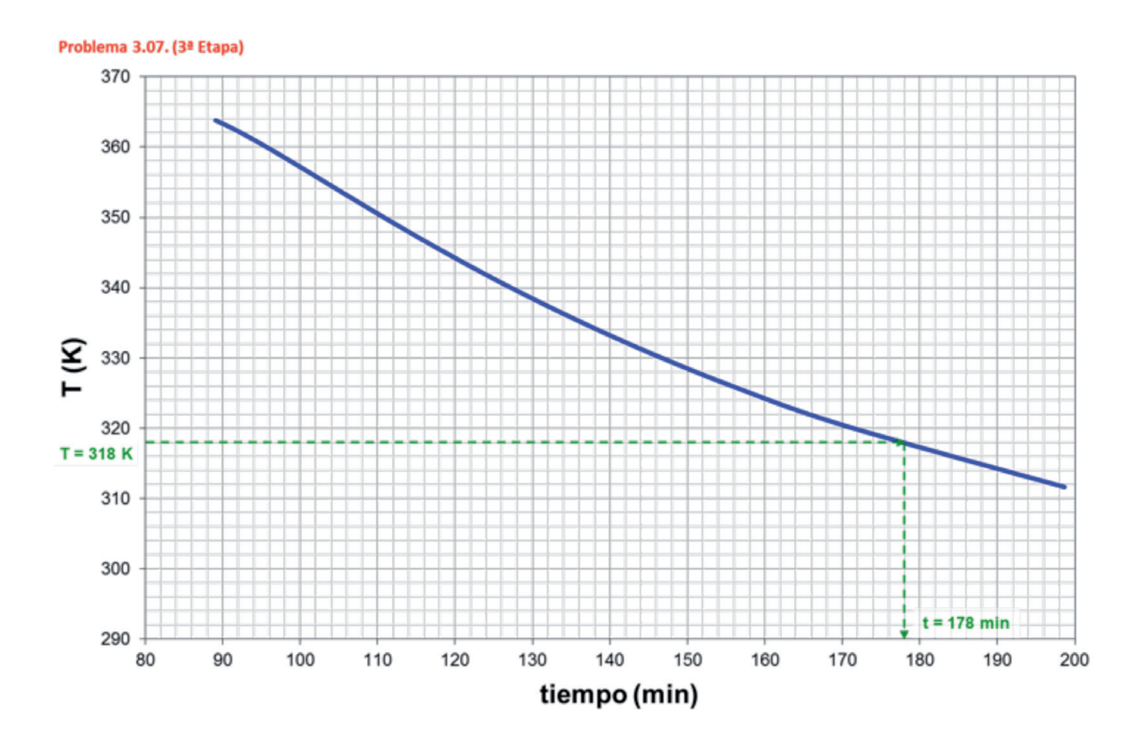


Figura 3.19. Evolución de la temperatura del reactor con el tiempo de reacción, T = f(t), durante la 3.ª etapa

SOLUCIÓN: ***a)*** **t = 68.4 min y t_T = 210.3 min = 3.5 h**
b) **t_T = 3.4 h**

Problema 3.08. La reacción química reversible $A_1 \leftrightarrow A_2$ tiene lugar en fase líquida y se ha comprobado que es de primer orden. Dicha reacción va a llevarse a cabo en un RDTA que solo puede funcionar de forma no adiabática (isoterma y/o intermedia). Por problemas de ebullición la temperatura máxima permisible es 77 °C. Calcular el tiempo mínimo de reacción necesario para que el 80 % de los reactivos se conviertan en productos.

Datos y notas

La mezcla inicial es una disolución acuosa (con un 10 % de A_1 y un 90 % de agua, porcentajes molares) en la que la concentración de A_1 es 1 mol/l

$r = 6.34 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left[\frac{-9500}{T}\right] \cdot c_1 - 3.56 \cdot 10^{32} \cdot \exp\left[\frac{-26900}{T}\right] \cdot c_2$ en mol/(min·l) cuando las concentraciones se expresan en mol/l.

$\Delta H_1^o = -144670$ J/mol; $C_{p1} = 655$ J/mol · K; $C_{p2} = 60$ J/mol · K; $C_{pagua} = 75$ J/mol · K

REACTOR

TIPO: RDTA, ISOTERMO Y/O INTERMEDIO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{U \cdot A \cdot (T_f - T)}{N_{k_0} \cdot \sum \theta_j \cdot \bar{C}_{p_j}} \cdot \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \leftrightarrow A_2$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = -144670$ J/mol

$\bar{C}_{p_1} = 655$ J/mol · K

$\bar{C}_{p_2} = 60$ J/mol · K

$\bar{C}_{p_{agua}} = 75$ J/mol · K

CINÉTICA: $$r = 6.34\cdot10^{10}\cdot\exp\left[\frac{-9500}{T}\right]\cdot c_1 - 3.56\cdot10^{32}\cdot\exp\left[\frac{-26900}{T}\right]\cdot c_2 \quad (\text{mol/min}\cdot\text{l})$$

(para c_1 y c_2 en mol/l)

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$x_{10} = 0.1$ ($0.9\ H_2O$)	$T^* = 77\ °C = 350\ K$
$c_{10} = 1$ mol/l	$X = 0.8$
	a) t = ?

RESULTADOS

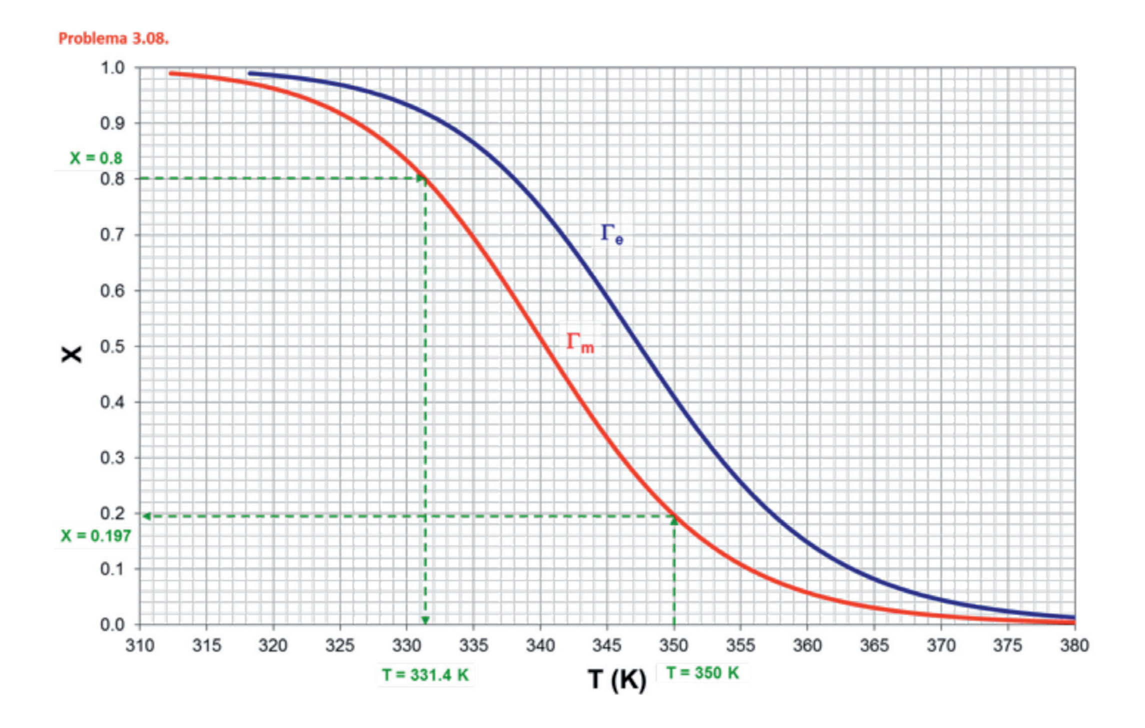


Figura 3.20. Evolución del grado de conversión con la temperatura del reactor: X = f(T)

SOLUCIÓN: t = 59.3 min

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

Problema 3.09. La reacción elemental, irreversible, en fase gas $A_1 + 2A_2 \rightarrow A_3$ tiene lugar en un RDTA a 2 atmósferas de presión constante. A 50 °C la constante de velocidad vale 110 $(m^3)^2/(kmol^2 \cdot min)$. La mezcla inicial consiste en una mezcla equimolar de A_1 y A_2, en la que no hay ni A_3 ni inertes. La energía de activación es 20000 kcal/kmol.

Calcular:

a) El valor de las velocidades de reacción r, $\Re_{A1}$, $\Re_{A2}$ y $\Re_{A3}$ cuando t = 0.
b) El valor de r cuando ha reaccionado la cuarta parte de A_1 inicialmente introducida en el RDTA.
c) El valor de r cuando t = 0 si la temperatura se aumentará a 60 °C.
d) El tiempo necesario para que reaccione la cuarta parte de A_1 inicialmente presente, si el RDTA es isotermo y se mantiene a 60 °C.

Datos y notas

Recuérdese que en los apartados *a*) y *b*) la temperatura del reactor es 50 °C.

REACTOR

TIPO: RDTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + 2A_2 \rightarrow A_3$; $A_1 = \frac{0.5}{1} = 0.5$ y $A_2 = \frac{0.5}{2} = 0.25 \Rightarrow A_k = A_2$

CINÉTICA: $k \ (T = 50^\circ C \equiv 323K) = 110 \quad (m^3)^2/(kmol^2 \cdot min)$

$r = k \cdot c_1 \cdot c_2^2$

$E = 20000$ kcal/kmol

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$P_0 = 2$ atm = cte $x_{10} = 0.5$ $x_{20} = 0.5$	*a*) T = 50°C = 323 K y t = 0 → r = ?, $\Re_{A1}$ = ?, $\Re_{A2}$ = ?, $\Re_{A3}$ = ? *b*) ha reaccionado ¼ A_1 → r = ? *c*) T = 60°C = 333 K y t = 0 → r = ? *d*) ha reaccionado ¼ A_1 y T = 60°C = 333 K → t = ?

RESULTADOS

SOLUCIÓN: ***a*) $r = 5.92\cdot10^{-3}$ kmol/m^3·min**

$\Re_{A1} = -5.92\cdot10^{-3}$ kmol/m^3·min

$\Re_{A2} = -11.84\cdot10^{-3}$ kmol/m^3·min

$\Re_{A3} = 5.92\cdot10^{-3}$ kmol/m^3·min

***b*) $r = 2.63\cdot10^{-3}$ kmol/m^3·min**

***c*) $r = 13.71\cdot10^{-3}$ kmol/m^3·min**

***d*) t = 1.13 min**

Problema 3.10. La reacción en fase líquida $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$ se lleva a cabo en un RDTA de 50 litros. La reacción es irreversible y de primer orden con respecto a cada reactivo.

a) Determinar el tiempo de reacción necesario para alcanzar un grado de conversión del 0.9 si:

a.1) el RDTA es adiabático

a.2) el RDTA es isotermo a la temperatura T_0

b) Determinar las funciones del tiempo de reacción Q* y T_f, en el supuesto de que se disponga de un serpentín en el interior del RDTA que permita mantener las condiciones isotermas del subapartado a.2.

c) Calcular y representar el perfil de X y T con el tiempo de reacción para las condiciones adiabáticas del subapartado a.1.

Datos y notas

$$\rho_{\text{fase líquida}} = 750\ \text{kg/m}^3 \quad ; \quad c_{10} = 0.50\ \text{kmol/m}^3 \quad ; \quad c_{20} = 0.75\ \text{kmol/m}^3$$

$T_0 = 400$K

$$\Delta H_1^o = -145000\ \text{kJ/kmol} \quad ; \quad C_{p\ \text{fase líquida}} = 3.8\ \text{kJ/kg}\cdot\text{K}$$

$$k = 1.4\cdot10^7\cdot\exp\left[\frac{-7700}{T}\right]\ \text{m}^3/\text{kmol}\cdot\text{min}$$

U · A = 0.1 kJ/s · K (solo para el apartado *b*)

REACTOR

TIPO: RDTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{U \cdot A \cdot (T_f - T)}{N_{k_0} \cdot \sum \theta_j \cdot \overline{C}p_j} \cdot \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA INTERCAMBIADOR: $Q^* = U \cdot A \cdot (T_f - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$

$\rho = 750 \text{ kg/m}^3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = -145000 \text{ kJ/kmol}$

$\overline{C}p_{\text{fase líquida}} = 3.8 \text{ kJ/kg} \cdot \text{K}$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 \cdot c_2$

$k = 1.4 \cdot 10^7 \cdot \exp\left[\frac{-7700}{T}\right] \quad (\text{m}^3/\text{kmol} \cdot \text{min})$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$c_{10} = 0.50 \text{ kmol/m}^3$	$V = 50 \text{ l} \equiv 50 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$; $X = 0.9$
$c_{20} = 0.75 \text{ kmol/m}^3$	*a*) Adiabático e Isotermo → t = ?
$T_0 = 400 \text{ K}$	*b*) Isotermo → ¿$Q^* = f(X)$? y ¿$T_f = f(X)$?
	c) Adiabático → ¿$X = f(T)$? y ¿$T = f(t)$?

INTERCAMBIADOR: $U \cdot A = 0.1 \text{ kJ/s} \cdot \text{K} \equiv 6 \text{ kJ/min} \cdot \text{K}$ (solo para el apartado *b*)

RESULTADOS

→ Apartado *b*

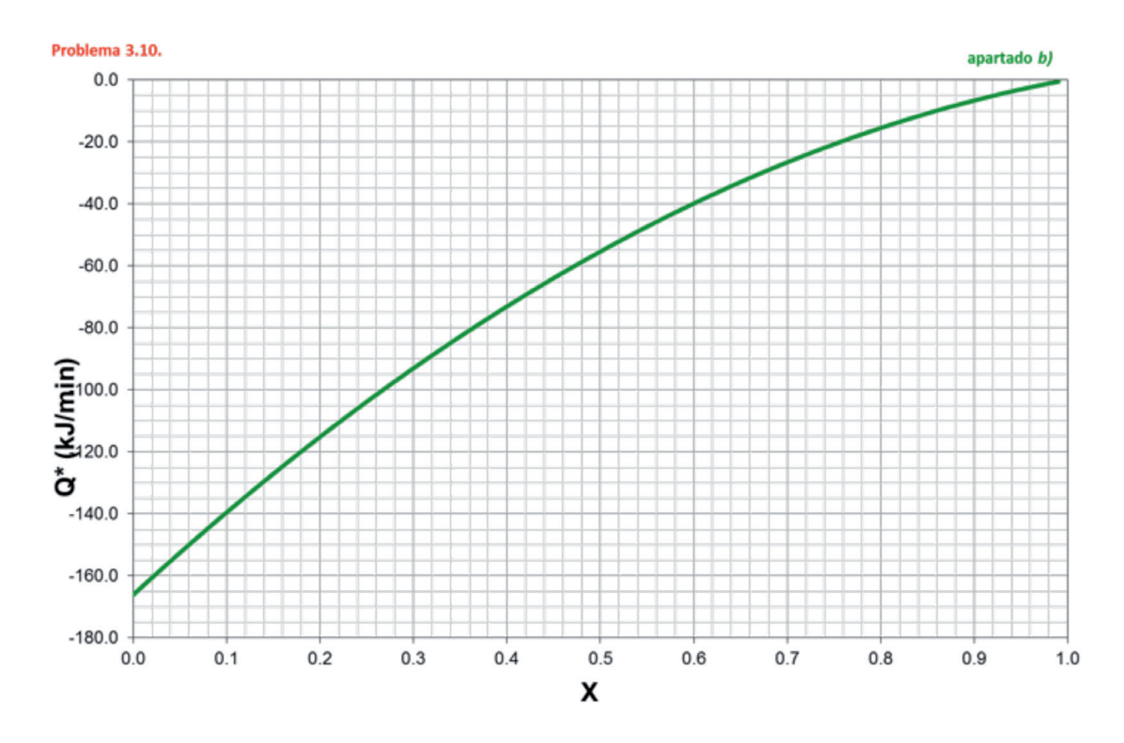


Figura 3.21. Evolución de Q* con el grado de conversión: Q* = f(X)

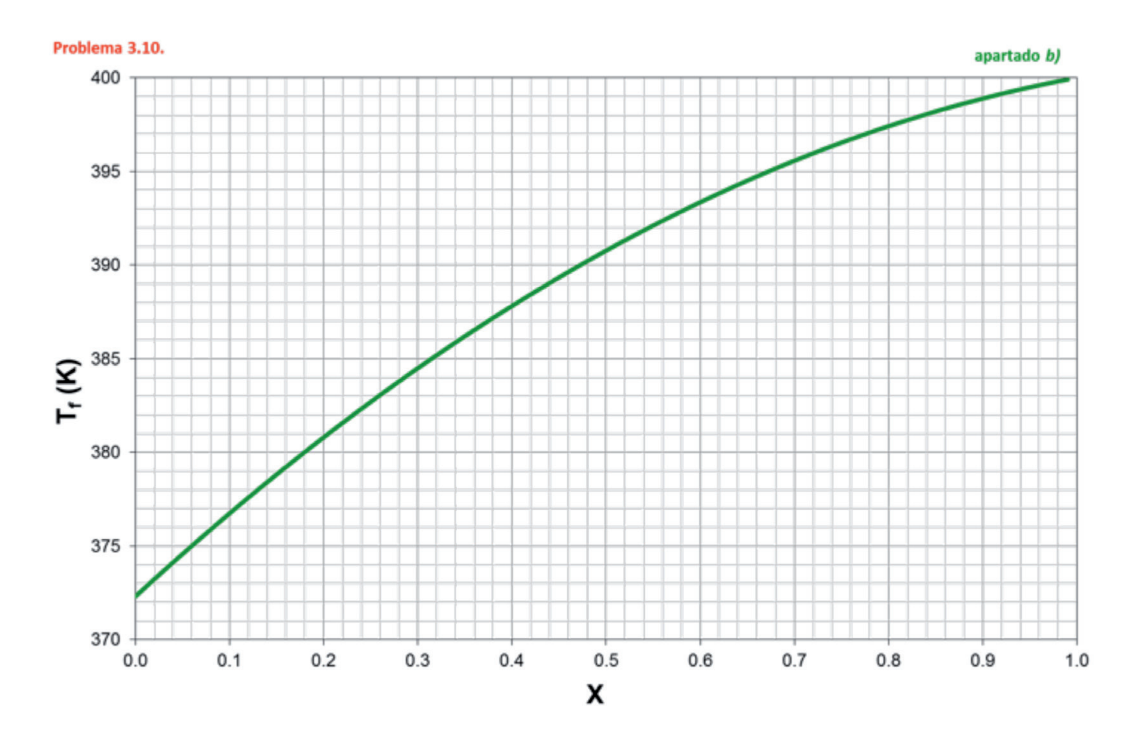


Figura 3.22. Evolución de T_f con el grado de conversión: $T_f = f(X)$

→ Apartado *c*

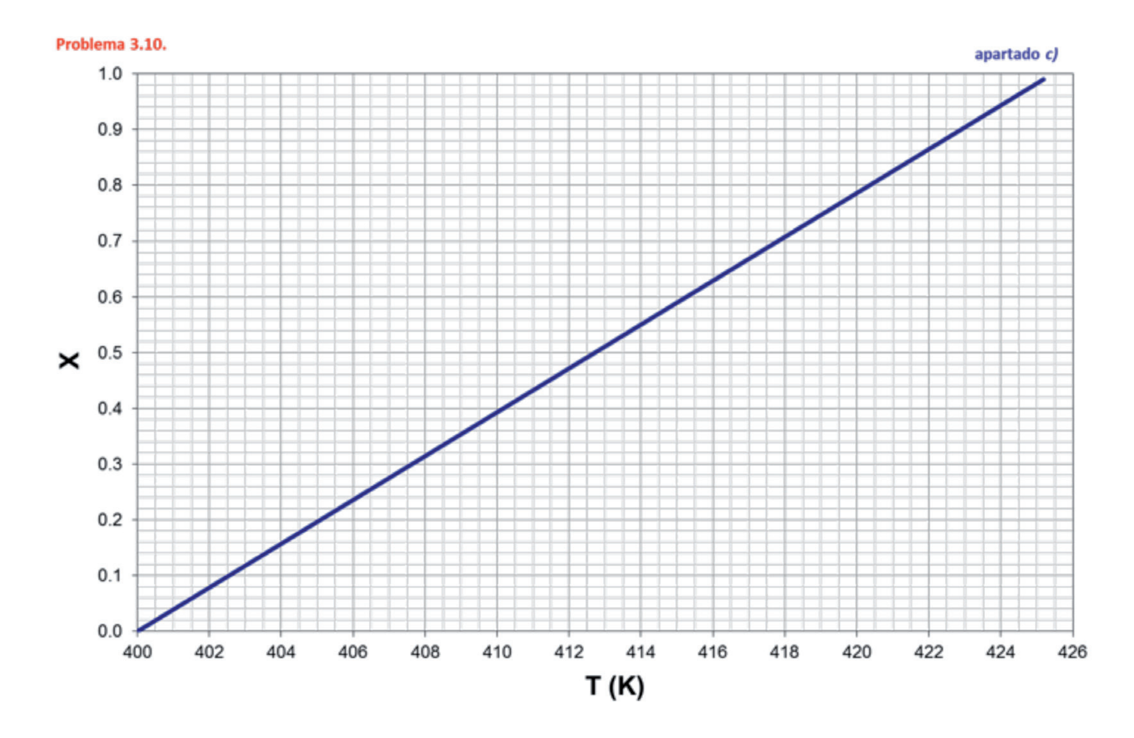


Figura 3.23. Evolución del grado de conversión con la temperatura del reactor: X = f(T)

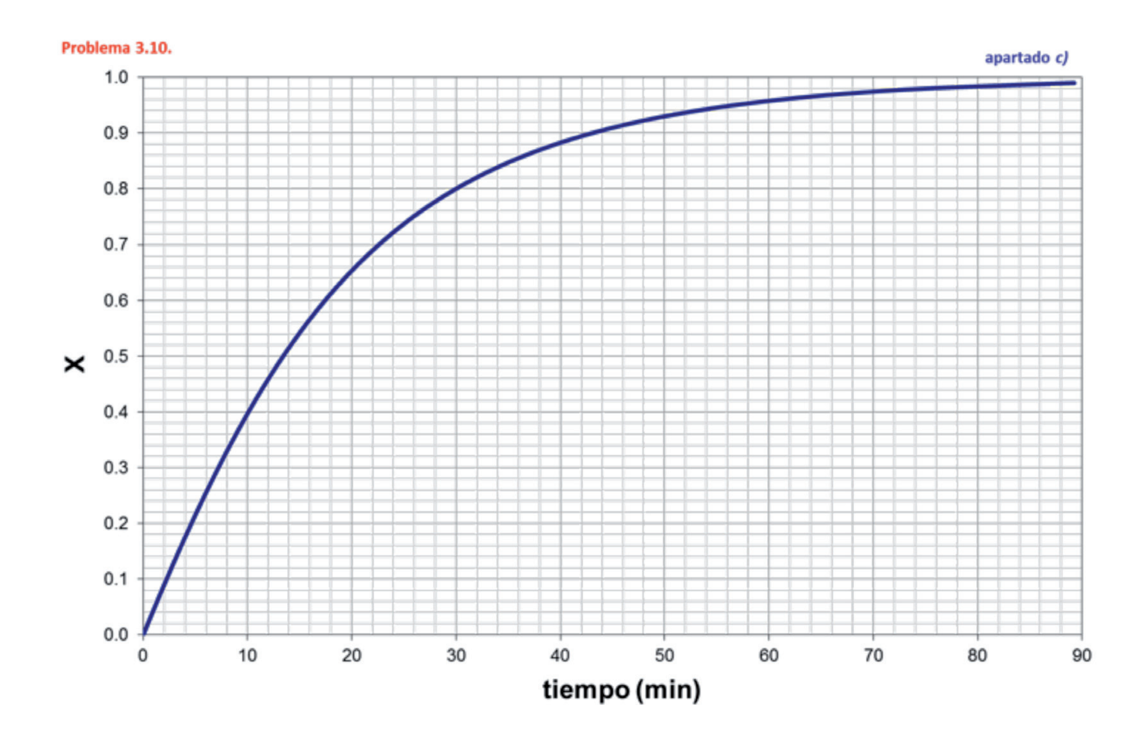


Figura 3.24. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción: X = f(t)

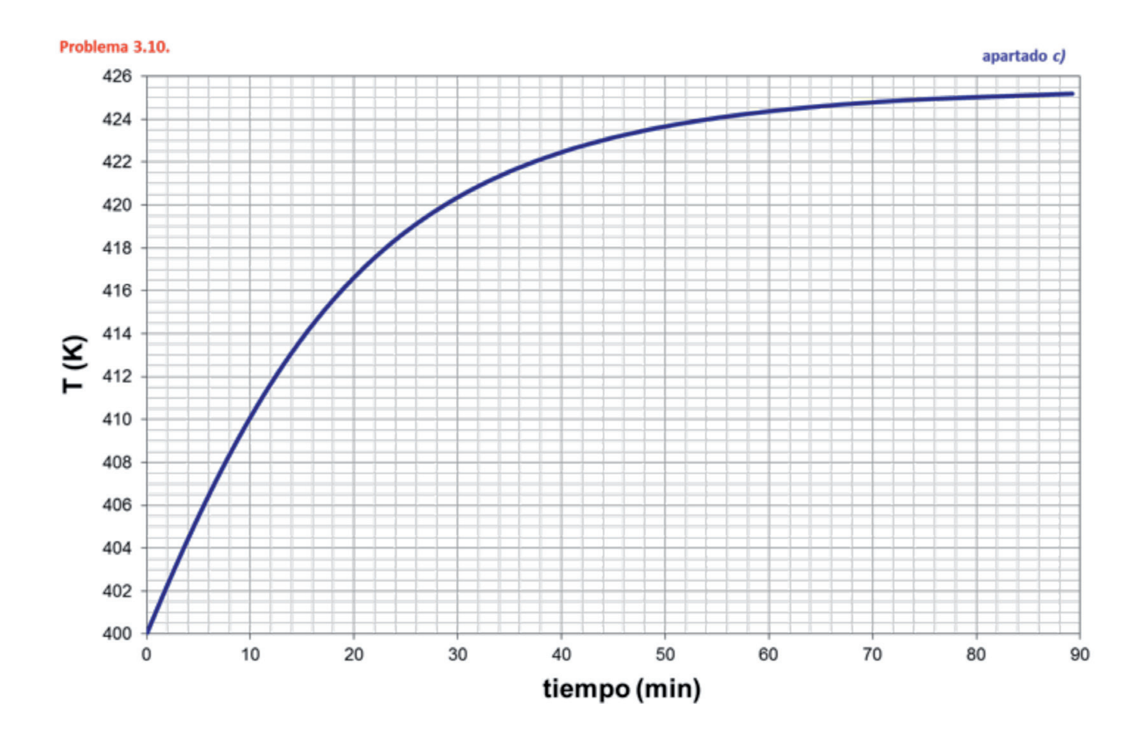


Figura 3.25. Evolución de la temperatura con el tiempo de reacción: T = f(t)

SOLUCIÓN: ***a)* a.1. t = 43.0 min (adiabático)**

a.2. t = 90.8 min (isotermo)

***b)* Q* = -221.45·(1-X)(0.75-0.5X)**

T_f = 400-36.91·(1-X)(0.75-0.5X)

***c)* X = f(T), X = f(t), T = f(t) (ver figuras 3.23., 3.24. y 3.25.)**

Problema 3.11. La reacción irreversible, de segundo orden, en fase líquida, $A_1 \rightarrow \text{productos}$ se desarrolla en un RDTA provisto de un intercambiador de calor. La mezcla inicial está constituida por A_1 puro, con una concentración de 16 mol/l, que se encuentra a 350 K.

a) Calcular la evolución de la temperatura y el grado de conversión con el tiempo de reacción cuando el valor de U · A/V es 5500 J/h · l · K

b) ¿Qué sucedería si el RDTA fuera adiabático?

Datos y notas

c_{10} = 16 mol/l

$$\Delta H_1^o = -\left(11625 + 11.625 \cdot T\right)\ \text{J/mol} \quad ; \quad C_{p1} = 1860\ \text{J}/\ell \cdot \text{K}$$

$$k = 554726 \cdot \exp\left[\frac{-5000}{T}\right] \quad (\text{l/mol} \cdot \text{h})$$

T_{f0} = 300K

REACTOR

TIPO: RDTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{U \cdot A \cdot (T_f - T)}{N_{k_0} \cdot \sum \theta_j \cdot \overline{C}_{p_j}} \cdot \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA INTERCAMBIADOR: $Q^* = U \cdot A \cdot (T_f - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = -(11625 + 11.625 \cdot T) \quad (J/mol)$$

$$\overline{C}_{p_1} = 1860\ J/l \cdot K$$

CINÉTICA:

$$r = k \cdot c_1^2$$

$$k = 554726 \cdot \exp\left[\frac{-5000}{T}\right] \quad (l/mol \cdot h)$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$x_{10} = 1$	*a*) ¿T = f(t)? y ¿X = f(t)?
$c_{10} = 16$ mol/l	*b*) RDTA Adiabático
$T_0 = 350$ K	

INTERCAMBIADOR: $T_f = 300K$

$$\frac{U \cdot A}{V} = 5500\ J/h \cdot l \cdot K$$

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7

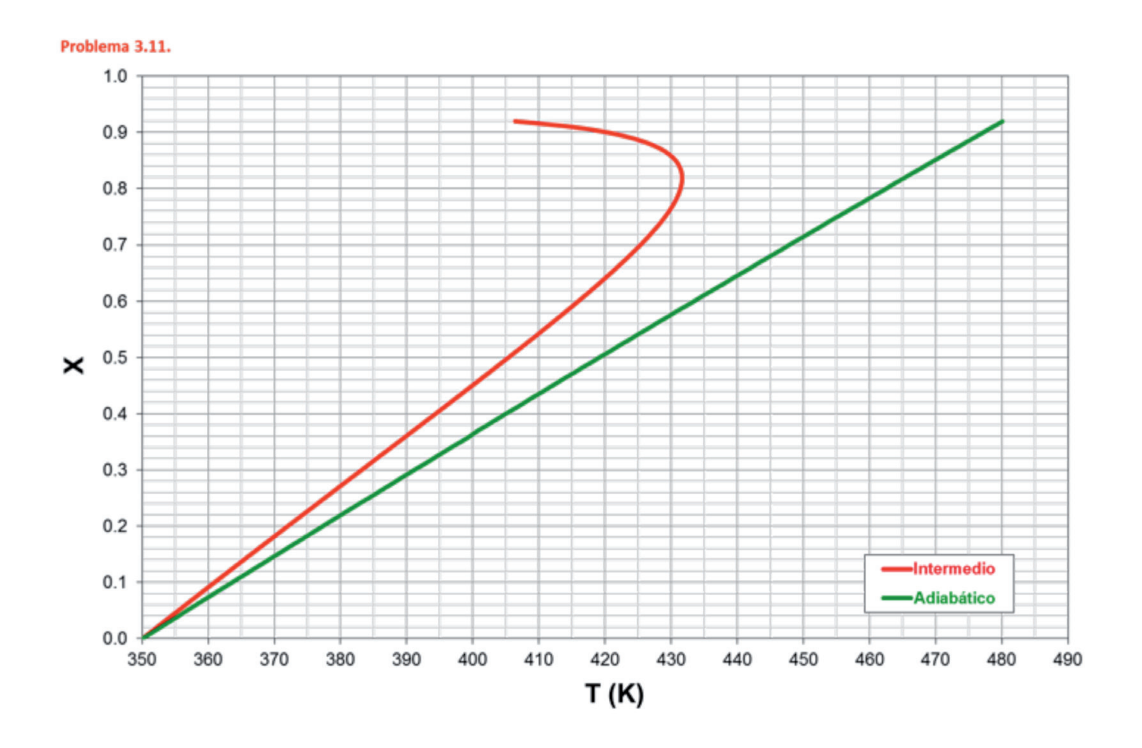


Figura 3.26. Evolución del grado de conversión con la temperatura del reactor: X = f(T)

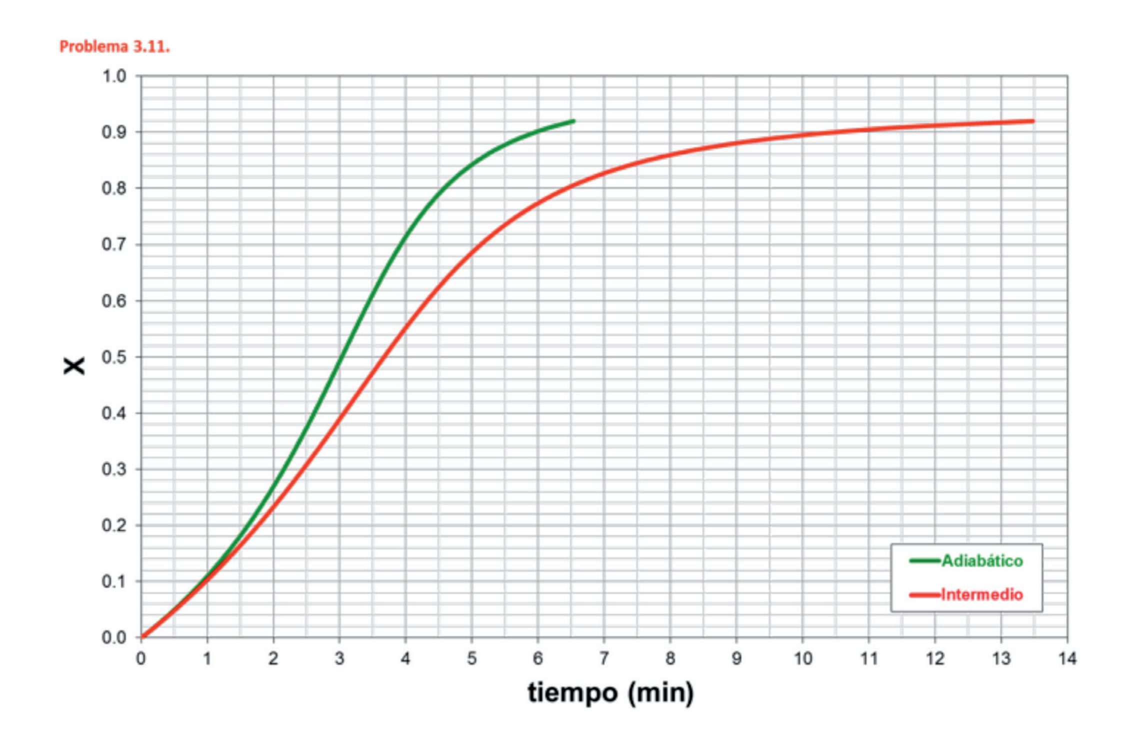


Figura 3.27. Evolución del grado de conversión con el tiempo de reacción: X = f(t)

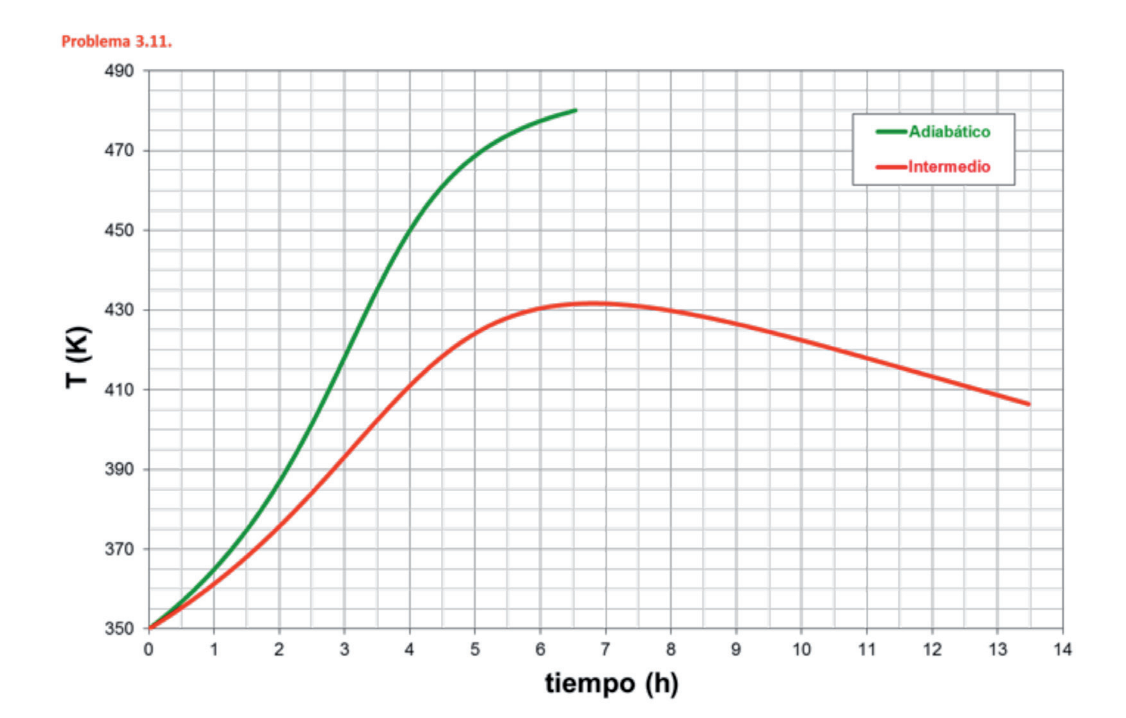


Figura 3.28. Evolución de la temperatura del reactor con el tiempo: T = f(t)

SOLUCIÓN: ***a)*** **X = f(T), X = f(t), T = f(t) (ver figuras 3.26., 3.27. y 3.28. RDTA Intermedio)**

c) **X = f(T), X = f(t), T = f(t) (ver figuras 3.26., 3.27. y 3.28. RDTA Adiabático)**

Problema 3.12. Se quiere desarrollar, en fase líquida, la reacción endotérmica irreversible de tercer orden $3A_1 \rightarrow 2A_2 + A_3$. Para ello se utilizará un RDTA adiabático. La mezcla de reacción está constituida inicialmente por A_1 puro y se calentará dentro del reactor hasta 400 °C. Durante este periodo de calentamiento se alcanza un grado de conversión de 0.1. A partir de ese momento, calcular el tiempo de reacción necesario para alcanzar un grado de conversión de 0.7.

Datos y notas

$m_{10} = 950$ kg ; $N_{10} = 10.2$ kmol
$V = 1$ m^3
$\Delta H_1^o = 104650 \text{ kJ/kmol} \quad ; \quad C_{p1} = 2.48 \text{ kJ/kg} \cdot \text{K}$

$$\ln k = \frac{-5000}{T} + 5 \quad (\text{m}^3/\text{kmol})^2 \cdot \text{h}^{-1}$$

REACTOR

TIPO: RDTA, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dt}{dX} = \frac{c_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $T = T_0 + J \cdot X$

REACCIÓN

ESQUEMA: $3A_1 \rightarrow 2A_2 + A_3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = 104650 \quad kJ/kmol$

$\overline{C}_{p_j} = 2.47 \ kJ/kg \cdot K$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1^3$

$$\ln k = \frac{-5000}{T} + 5 \quad (m^3/kmol)^2 \cdot h^{-1}$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$x_{10} = 1$	$V = 1 m^3$
$m_{10} = 950$ kg	$X = 0.7$
$N_{10} = 10.2$ kmol	$t = ?$
$T_0 = 400$ °C ≡ 673 K	

RESULTADOS

SOLUCIÓN: $t = 10$ h

CAPÍTULO 4

Reactor continuo tubular de flujo de pistón (RFP) intermedio y adiabático

Problema 4.01. Un compuesto orgánico experimenta una pirolisis al hacerlo circular a través de un RFP consistente en un tubo cilíndrico que atraviesa el interior de un horno. Se desea desarrollar la reacción endotérmica a temperatura constante e igual a 675 °C. Se sabe que su cinética es de primer orden y que la constante de velocidad, expresada en s^{-1}, varía con la temperatura según la expresión:

$$\ln k = 34.34 - \frac{34000}{T}$$

La temperatura del aire que rodea al tubo coincide prácticamente con la de las paredes del horno y es de 1000 °C. El coeficiente global de transmisión de calor por convección y radiación desde el horno al interior del tubo vale 34 J/s·m²·K. En estas condiciones la cantidad de calor que recibe la mezcla de reacción por unidad de tiempo es $2.11 \cdot 10^6$ kJ/h para obtener un grado de conversión de 0.3.

¿Cuáles serán las dimensiones del tubo de reacción si el caudal volumétrico del alimento es 4.245 m³/s?

REACTOR

TIPO: RFP, ISOTERMO
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $dV = F_{k_0} \cdot \frac{dX}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA REACTOR: $\frac{dT}{dX} = J + \cdot \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r} \cdot \frac{dQ}{dl}$

BALANCE DE ENERGÍA INTERCAMBIADOR: $Q^* = U \cdot A \cdot (T_f - T)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1$

$$\ln k = 34.34 - \frac{34000}{T} \quad \rightarrow \quad k = 8.197 \cdot 10^{14} \cdot \exp\left[\frac{-34000}{T}\right] \quad (s^{-1})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 =$ 675 °C = 948 K = cte	X = 0.3
$Q_{v0} = 4.245$ m³/s	*a*) L = ?

INTERCAMBIADOR: $T_f = 1000\ °C = 1273\ K$

$$U = 34\ J/s \cdot m^2 \cdot K \equiv 34 \cdot 10^{-3}\ kJ/s \cdot m^2 \cdot K$$

$$Q^* = 2.11 \cdot 10^6\ kJ/h \equiv 586.11\ kJ/s$$

RESULTADOS

SOLUCIÓN: L = 32.16 m

(A = 53.04 m² y V = 6.96 m³)

Problema 4.02. Se desea descomponer acetaldehído en metano y monóxido de carbono utilizando un RFP adiabático. La reacción en fase gas se desarrolla según el esquema $CH_3CHO \rightarrow CH_4 + CO$. Si el alimento, acetaldehido puro, se introduce en el reactor a 780 K, con un caudal molar de 0.1 mol/s y la presión de operación es una atmósfera, calcular:

a) La longitud del reactor requerida para alcanzar un conversión de 0.95, si la sección libre de paso es 0.15 m².

b) La temperatura de salida de la mezcla de reacción.

Datos y notas

$$\Delta H_k^0 = -19050 \text{ J / mol} \quad ; \quad C_{p(CH_3CHO)} = 134.3 \text{ J / mol} \cdot \text{K}$$

$r = 3.3 \cdot 10^{-4} c_1^2 \exp\left(31.71 - \dfrac{25080}{T}\right)$ que viene en mol/s·m³ cuando la concentración de acetaldehido se expresa en mol/m³

REACTOR

TIPO: RFP, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $\dfrac{dl}{dX} = \cdot \dfrac{G_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot X$

REACCIÓN

ESQUEMA: $CH_3CHO \rightarrow CH_4 + CO$

$A_1 \rightarrow A_2 + A_3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = -19050$ J/mol

$\overline{C}_{p_1} = 134.3$ J/mol·K

CINÉTICA:

$$r = 3.3 \cdot 10^{-4} \cdot c_1^2 \cdot \exp\left(31.71 - \frac{25080}{T}\right) \quad (\text{mol/s} \cdot \text{m}^3) \text{ si } c_1 \ (\text{mol/m}^3)$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 780$ K	$X = 0.95$
$x_{10} = 1$	*a*) L = ?
$F_{10} = 0.1$ mol/s	*b*) T = ?
P = 1 atm	
$S = 0.15$ m²	

RESULTADOS

SOLUCIÓN: ***a***) **L = 19.15 m**
b) **T = 914.8 K**

Problema 4.03. La descomposición de la fosfamina tiene lugar a temperaturas elevadas según el esquema de reacción en fase gas $4PH_3 \rightarrow P_4 + 6H_2$. La reacción es endotérmica e irreversible, ajustándose bien a una cinética de primer orden según la ecuación $-\Re_{PH_3} = k \cdot c_{PH_3}$. Si se parte de fosfamina pura, a 945 K, con caudal másico de 22.7 kg fosfamina/h y la reacción se desarrolla en un RFP adiabático, calcular el tamaño del reactor requerido para alcanzar una conversión de 0.3 si el reactor opera a la presión atmosférica.

Datos y notas

Mediante un balance energético se ha determinado la variación de T con X, que se detalla en la tabla siguiente, junto con los valores de *k* a diferentes temperaturas.

X	0.00	0.10	0.20	0.25	0.30
T (K)	945	885	826	797	768
k (s^{-1})	37.2	1.42	$3.65 \cdot 10^{-2}$	$3.00 \cdot 10^{-3}$	$5.83 \cdot 10^{-4}$

REACTOR

TIPO: RFP, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $dV = F_{k_0} \cdot \dfrac{dX}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot X$

REACCIÓN

ESQUEMA: $4PH_3 \rightarrow P_4 + 6H_2$

$4A_1 \rightarrow A_2 + 6A_3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$T = f(X) \rightarrow T = 944.5\text{-}590 \cdot X \;;\; R^2 = 1$

CINÉTICA:

$$\left.\begin{array}{l}\Re_1 = -k \cdot c_1 \\ \Re_1 = \nu_1 \cdot r\end{array}\right\} -4 \cdot r = -k \cdot c_1 \quad \rightarrow \quad r = \frac{1}{4} \cdot k \cdot c_1$$

$$\ln(k) = f\left(\frac{1}{T}\right) \quad \rightarrow \quad k = 6.412 \cdot 10^{22} \cdot \exp\left(-\frac{46204}{T}\right)$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR
$T_0 = 945$ K	$X = 0.3$
$x_{10} = 1$	*a*) $V = ?$
$P_0 = 1$ atm	
$m_{10} = 22.7$ kg/h	
$M_1(PH_3) = 34$ kg/kmol	

RESULTADOS

Tabla 4.1. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

X	T (K)	k (s^{-1})	1/T (K^{-1})	ln k (s^{-1})
0.00	945	3.72E + 01	0.00106	3.61631
0.10	885	1.42E + 00	0.00113	0.35066
0.20	826	3.65E – 02	0.00121	–3.31044
0.25	797	3.00E – 03	0.00125	–5.80914
0.30	768	5.83E – 04	0.00130	–7.44732

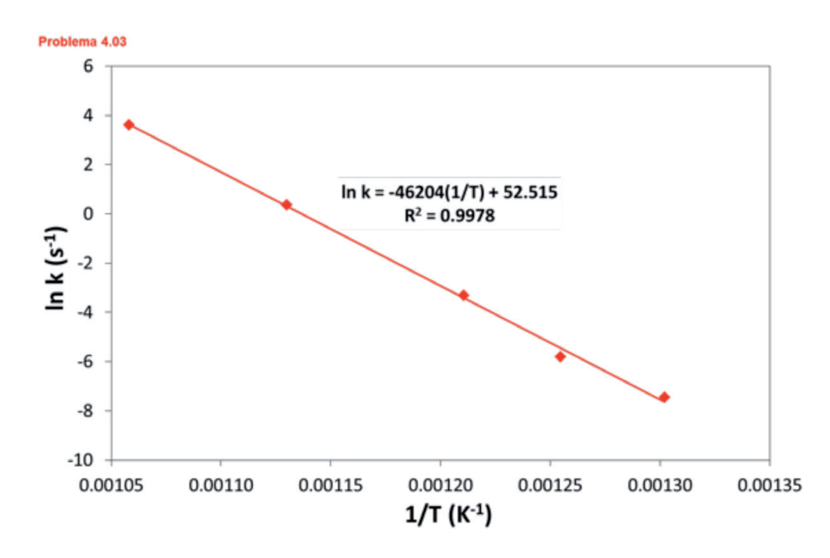


Figura 4.1. Ajuste de la variación de la constante de velocidad con la temperatura

SOLUCIÓN: $V = 0.966\ m^3 \approx 1\ m^3$

Problema 4.04. La descomposición de la fosfamina tiene lugar a temperaturas elevadas según el esquema de reacción en fase gas $4PH_3 \rightarrow P_4 + 6H_2$. La reacción es endotérmica e irreversible, ajustándose bien a una cinética de primer orden según la ecuación $-\Re_{PH_3} = k \cdot c_{PH_3}$. La constante de velocidad, expresada en s^{-1}, varía con la temperatura según la expresión:

$$\log k = -\frac{18963}{T} + 2 \cdot \log T + 12.13$$

En una instalación industrial se desea obtener fósforo por descomposición de la fosfamina en un RFP que operará a la presión atmosférica, al que se inyecta una corriente de fosfamina pura con un caudal másico de 45 kg/h y a 680 °C. Si el tubo de reacción está situado dentro de una cámara de calefacción en la que puede admitirse que la temperatura del fluido calefactor permanece constante a 700 °C:

a) Deducir las ecuaciones a partir de las que se podría calcular la variación de X y T a lo largo del reactor.
b) Calcular la longitud del reactor requerida para alcanzar una conversión de 0.6.

Datos y notas

Diámetro del reactor: 0.10 m
Peso molecular de la fosfamina: 34 kg/kmol
$\Delta H_k^0 = 23713$ kJ/mol; $C_{p(PH_3)} = 52.7$ kJ/mol · K; $C_{p(P_4)} = 62.4$kJ/kmol · K

REACTOR

TIPO: RFP
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dl}{dX} = \cdot \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{1}{(-\nu_k) \cdot r} \cdot \frac{1}{R_h} \cdot \frac{U \cdot (T_f - T)}{\sum \theta_j \overline{C}_{p_j}}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $4PH_3 \rightarrow P_4 + 6H_2$

$4A_1 \rightarrow A_2 + 6A_3$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_k^0 = 23713 \text{ kJ/mol}$$

$$\overline{C}_{P_1} = 52.7 \text{ kJ/kmol}\cdot\text{K} \;\; ; \;\; \overline{C}_{P_2} = 62.4 \text{ kJ/kmol}\cdot\text{K} \;\; ; \;\; \overline{C}_{P_3} = 30.1 \text{ kJ/kmol}\cdot\text{K}$$

CINÉTICA:

$$\left.\begin{array}{l}\mathfrak{R}_1 = -k\cdot c_1 \\ \mathfrak{R}_1 = \nu_1\cdot r\end{array}\right\} -4\cdot r = -k\cdot c_1 \quad \rightarrow \quad r = \frac{1}{4}\cdot k\cdot c_1$$

$$\log(k) = -\frac{18963}{T} + 2\cdot\log(T) + 12.13 \quad (s^{-1})$$

$$k = 10\wedge\left[-\frac{18963}{T} + 2\cdot\log(T) + 12.13\right]$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR	SALIDA
T_0 = 680 °C = 953 K	D = 0.10 m	X = 0.6
x_{10} = 1, m_{10} = 45 kg/h		*a)* ¿dl/dX y dT/dX = f(X,T)?
P_0 = 1 atm		*b)* L = ?

INTERCAMBIADOR: $T_f = 700\ °C = 973\ K = \text{cte}$

$$U = 10\ J/s\cdot m^2\cdot K \equiv 10\cdot 10^{-3}\ kJ/s\cdot m^2\cdot K$$

RESULTADOS

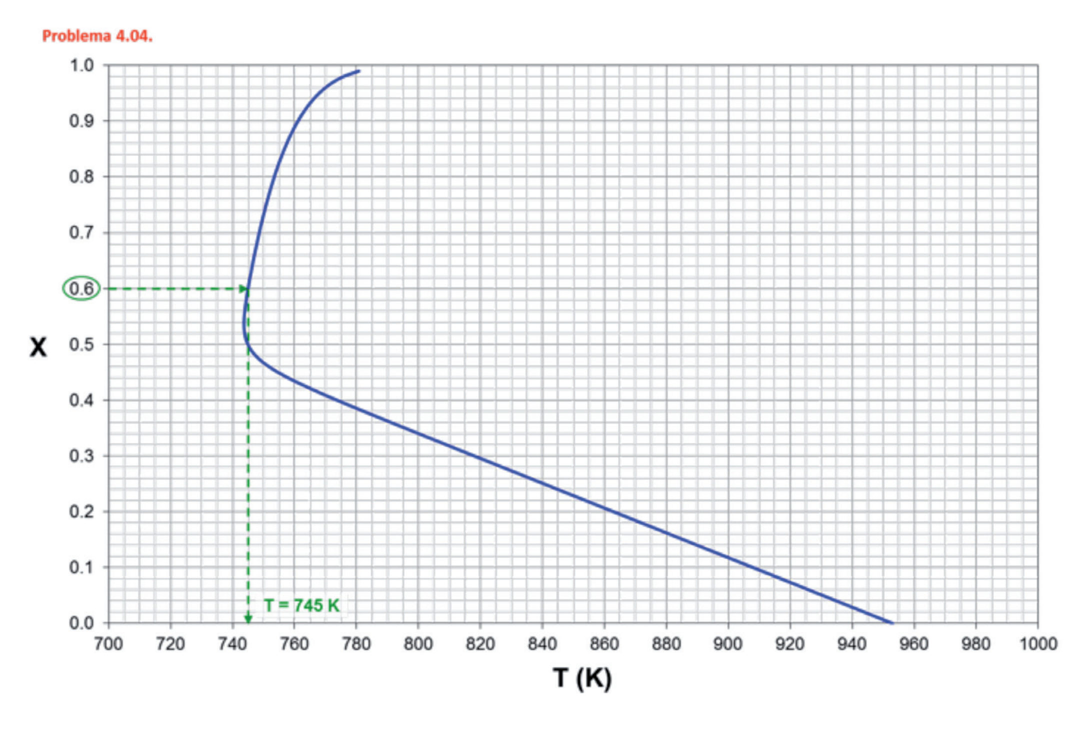


Figura 4.2. Evolución del grado de conversión con la temperatura de reacción: X = f(T)

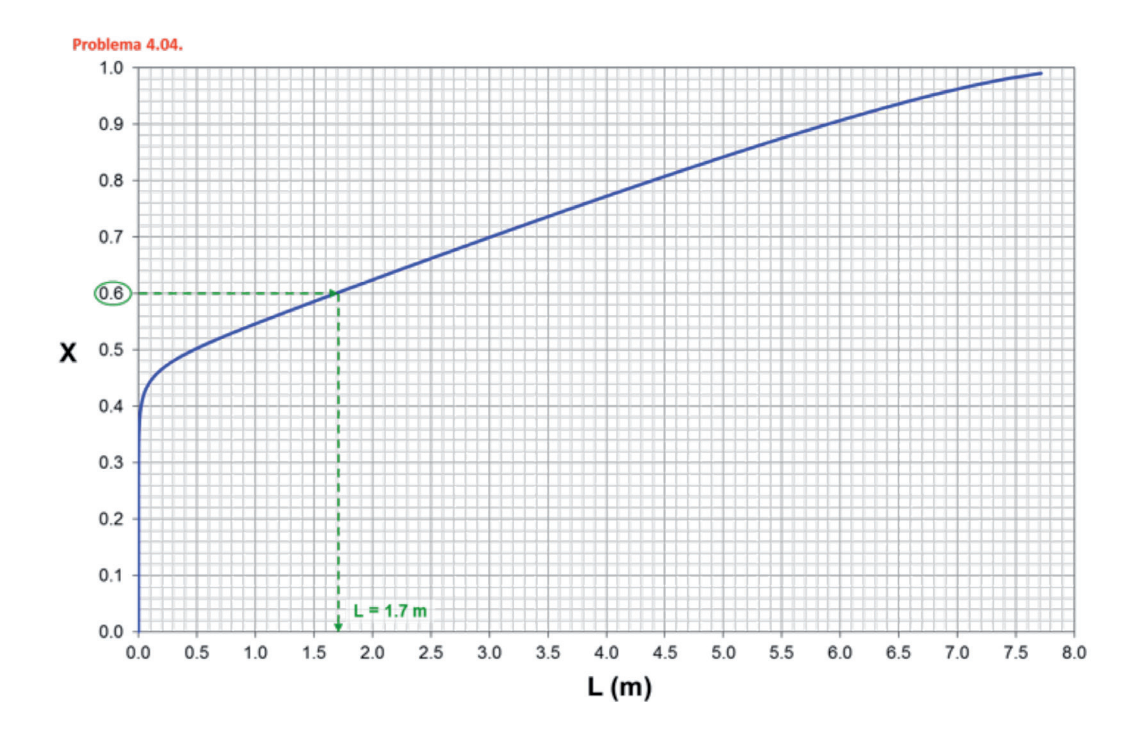


Figura 4.3. Evolución del grado de conversión con la longitud del reactor: X = f(L)

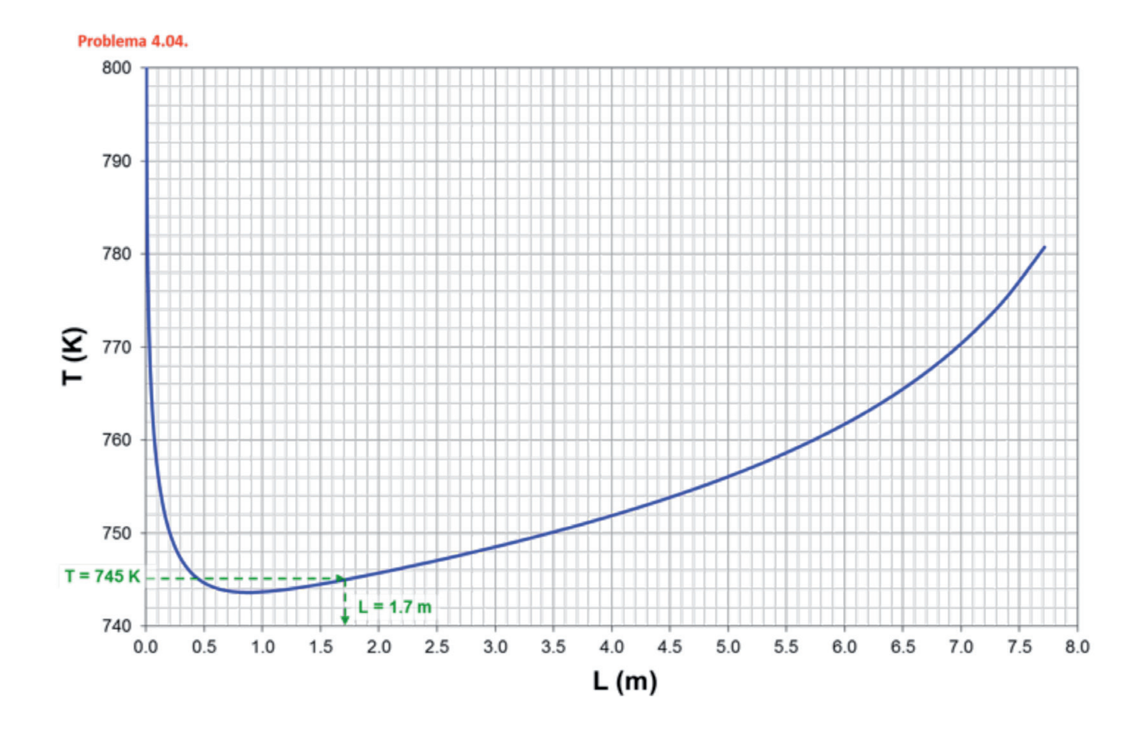
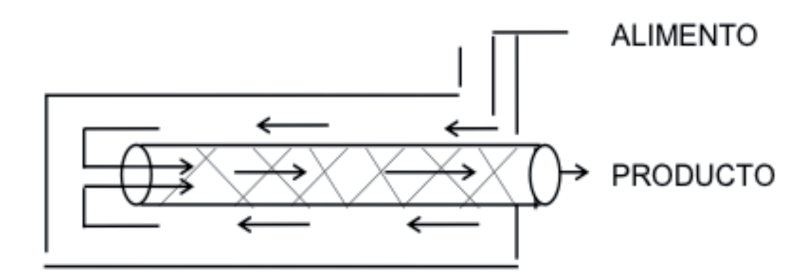


Figura 4.4. Evolución de la temperatura de reacción con la longitud del reactor: T = f(L)

SOLUCIÓN: ***a*) X = f(T), X = f(L) y T = f(L) (ver figuras 4.2., 4.3. y 4.4.)**

***b*) L = 1.7 m**

Problema 4.05. La reacción elemental, reversible, en fase gaseosa catalizada por un sólido $A_1 + A_2 \leftrightarrow 2A_3$ se lleva a cabo en el RFP autotérmico que se esquematiza a continuación:



El alimento se introduce en el espacio anular existente entre el tubo exterior, aislado, y el tubo interior que contiene el catalizador. En el espacio anular se precalienta, pasando luego al tubo interior donde se desarrolla la reacción. En dicha zona anular no tiene lugar reacción química alguna. El intercambio de calor entre la mezcla gaseosa que circula por el tubo interior y el gas que circula por el espacio anular, en contracorriente, tiene lugar a lo largo de toda la longitud del primero.

El alimento consta exclusivamente de A_1 y A_2 en la proporción estequiométrica de la reacción, siendo el caudal de A_1 de 20 mol/s. El RFP trabaja a la presión de $5.8 \cdot 10^5$ N/m². La temperatura del alimento es 350 K. Si se desea obtener una conversión final de 0.74,

a) Obtener la variación de la conversión y la temperatura de la mezcla reactante a lo largo del reactor y representar la curva correspondiente en un diagrama X-T.
b) Calcular el volumen de reactor necesario para alcanzar el grado de conversión indicado.

Datos y notas

Diámetro del reactor: 0.025 m.
ΔH_k^0 = –20000 kJ/mol; $C_{p,1}$ = 25 J/mol · K; $C_{p,2}$ = 15 J/kmol · K; $C_{p,3}$ = 20 J/mol · K
k = 0.035 m³/kmol · min a 273 K; E = 70000 J/mol; K_c = 25000 (a 298K)
Coeficiente global de transmisión de calor: 5 w/m² · K.

REACTOR

TIPO: RFP, AUTOTÉRMICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $\dfrac{dl}{dX} = \cdot \dfrac{G_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $\dfrac{dT}{dX} = J + \dfrac{1}{(-\nu_k)\cdot r} \cdot \dfrac{1}{R_h} \cdot \dfrac{U\cdot(T_f - T)}{\sum \theta_j \overline{C}_{p_j}}$ donde

$T_f = T_{f_0} - (T_0 - T + J\cdot X)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \Leftrightarrow 2A_3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_1^0 = -20000$ kJ/mol

$\overline{C}_{p_1} = 25$ J/mol·K ; $\overline{C}_{p_2} = 15$ J/mol·K ; $\overline{C}_{p_3} = 20$ J/mol·K

CINÉTICA: $r = k\cdot c_1 \cdot c_2 - k'\cdot c_3^2$

$k = 0.035\ m^3/kmol\cdot min$ (a 273 K)

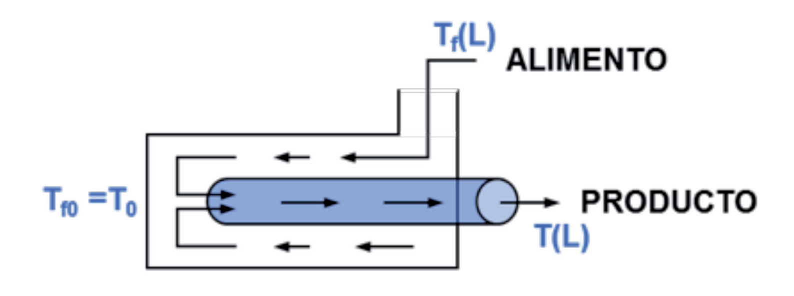
$K_c = 25000$ (a 298 K)

$E = 70000$ J/mol

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR /SALIDA
$T_f(L) = 350$ K	$D = 0.025$ m
$F_{10} = 20$ mol/s	$X = 0.74$
$x_{10} = 0.5$, $x_{20} = 0.5$	*a*) ¿X = f(T)?, ¿X = f(L)?, ¿T = f(L)?,
$P = P_0 = 5.8\cdot 10^5\ N/m^2$	*b*) V = ?

INTERCAMBIADOR: $U = 5\ W/m^2\cdot K$



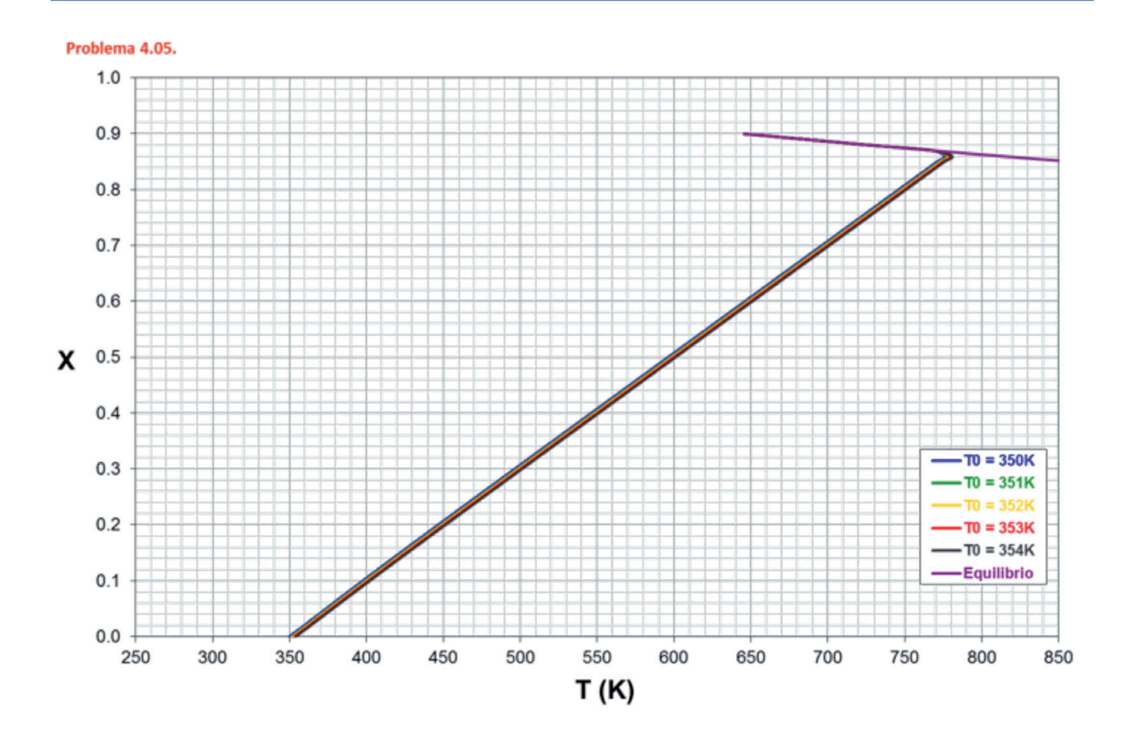


Figura 4.5. Evolución del grado de conversión con la temperatura de reacción: X = f(T)

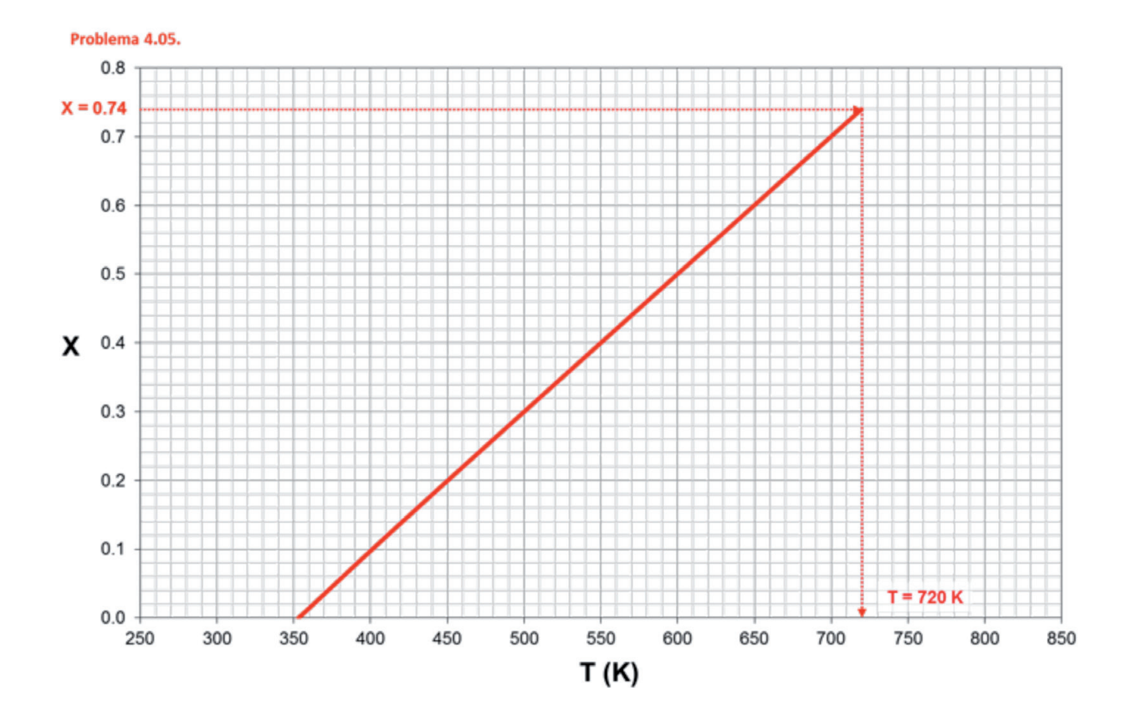


Figura 4.6. Evolución del grado de conversión con la temperatura de reacción: X = f(T). Resolución para X = 0.74 y T_0 = 353K

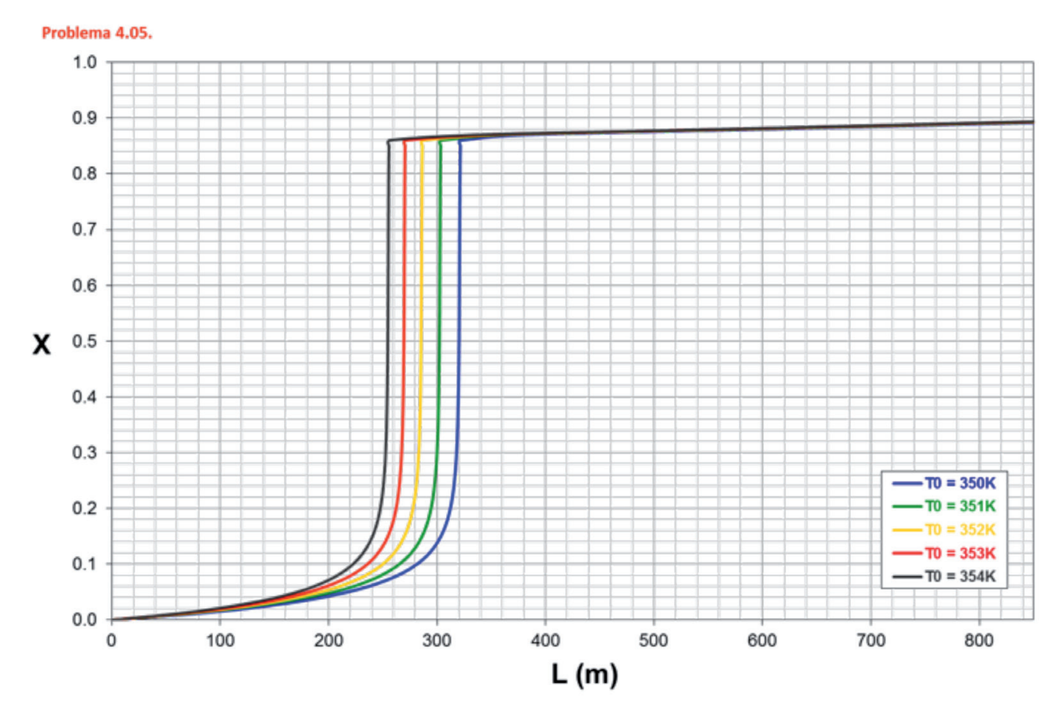


Figura 4.7. Evolución del grado de conversión con la longitud del reactor: X = f(L)

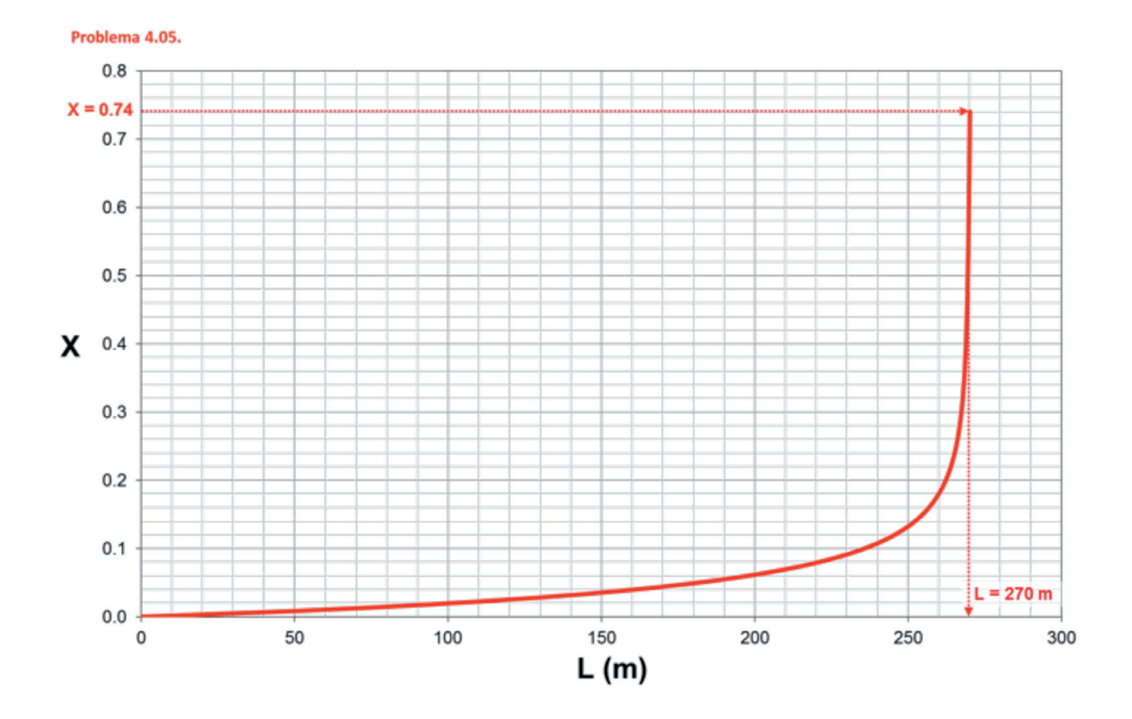


Figura 4.8. Evolución del grado de conversión con la longitud del reactor: X = f(L).
Resolución para X = 0.74 y T_0 = 353K

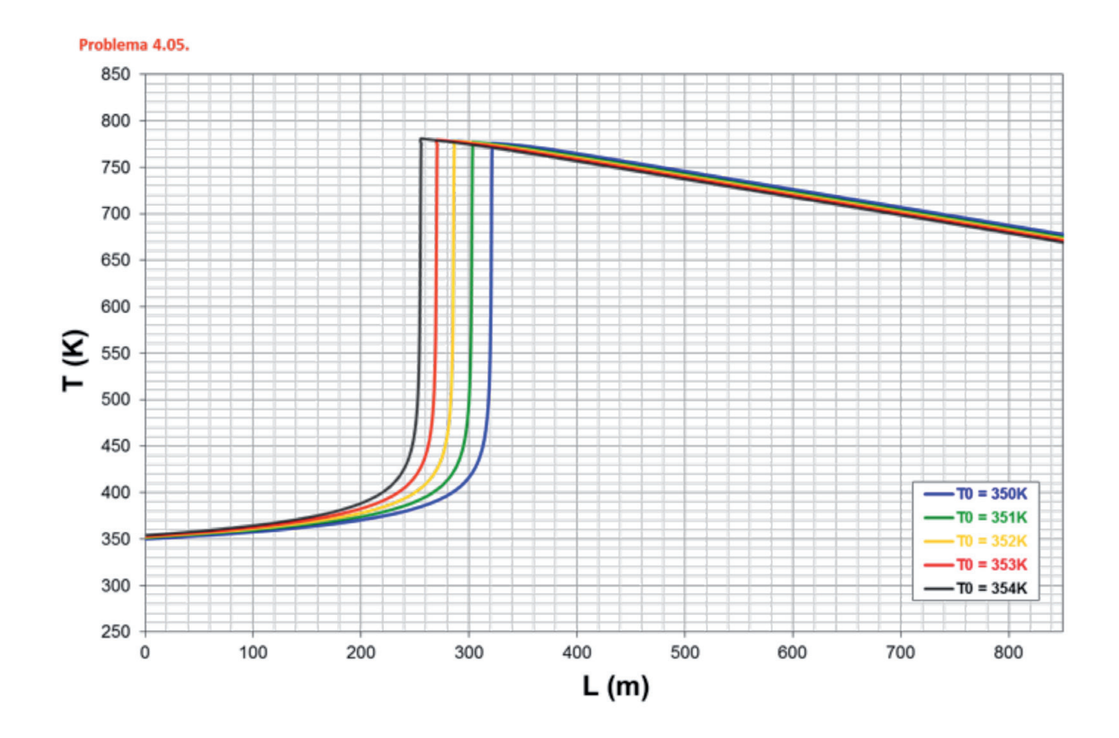


Figura 4.9. Evolución de la temperatura de reacción con la longitud del reactor: T = f(L)

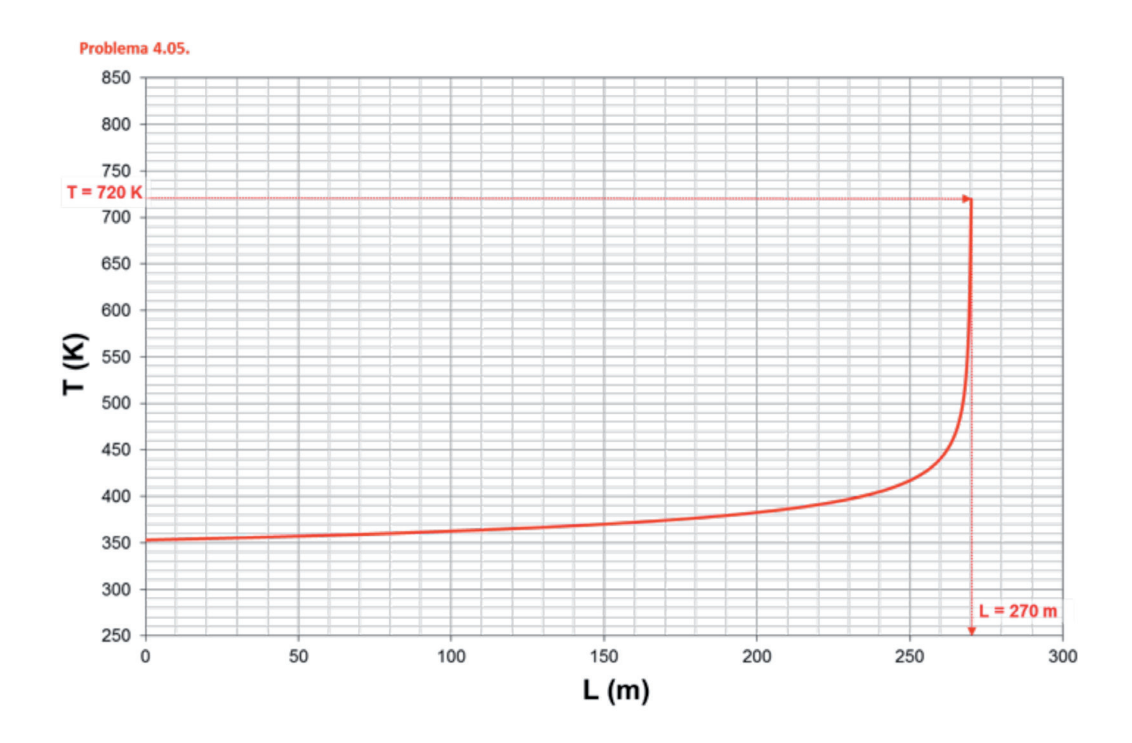


Figura 4.10. Evolución de la temperatura de reacción con la longitud del reactor: T = f(L). Resolución para X = 0.74 y T_0 = 353K

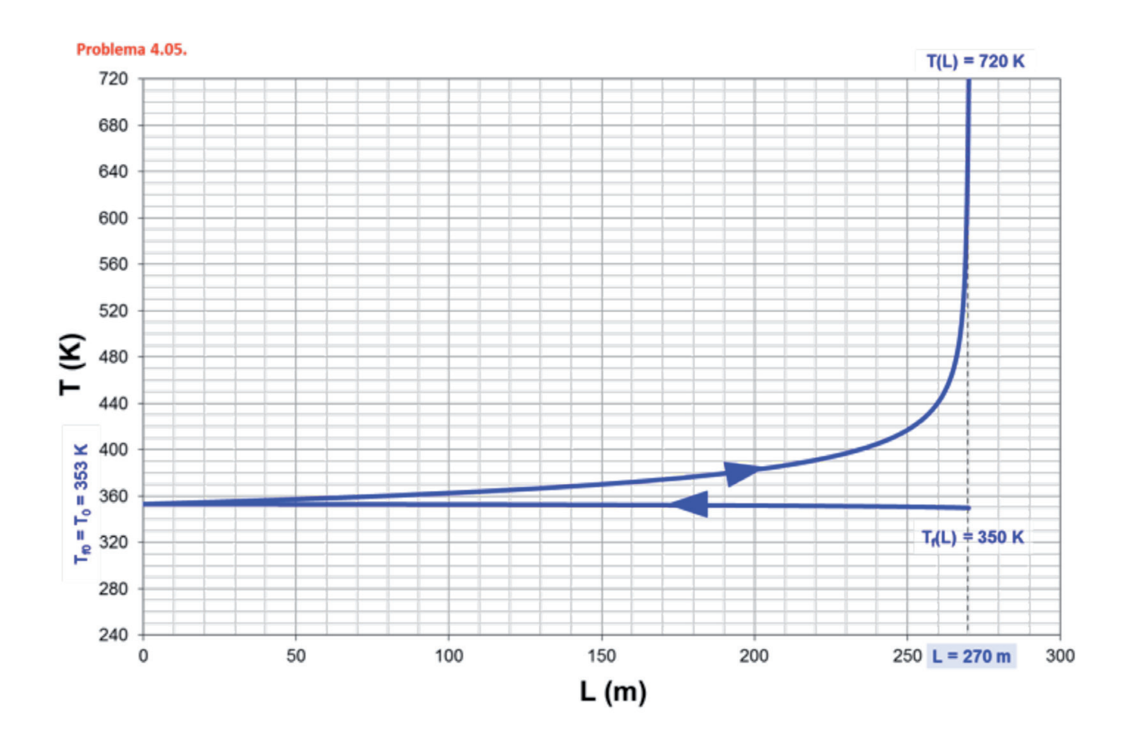


Figura 4.11. Evolución de la temperatura de reacción a lo largo de la longitud del reactor: T = f(L). Resolución para X = 0.74 y T_0 = 353K

SOLUCIÓN: ***a)*** **X = f(T), X = f(L) y T = f(L) (ver figuras 4.6., 4.8. y 4.10.)**
b) **V = 0.13 m³**

Problema 4.06. Se desea diseñar una planta piloto para la producción de A_3, según la siguiente reacción irreversible en fase gas $A_1 + A_2 \rightarrow A_3 + A_4$. El alimento al reactor consiste en una mezcla de 4 moles de A_2 por cada mol de A_1, a 200 °C. El caudal molar total del alimento es 0.17 · 10^{-3} kmol/h. El reactor está constituido por un tubo de 5 pulgadas de diámetro interno y perfectamente aislado del exterior para que su comportamiento se pueda considerar adiabático. Teniendo en cuenta que el producto A_3 se descompone a una temperatura superior a los 546 K, calcular la máxima posible longitud del reactor para evitar la descomposición de A_3

Datos y notas

La presión total es constante e igual a 2 atm.
ΔH_k^0 = –26800 kcal/mol
$C_{p,1}$ = 8.6 kcal/mol · K; $C_{p,2}$ = 25.3 Kcal/kmol · K; $C_{p,3}$ = 28 kcal/mol · K;
$C_{p,4}$ = 7.2 kcal/kmol · K

$r = 206 \cdot 10^6 \cdot \exp\left[\dfrac{-14233}{T}\right] \cdot p_1 \cdot p_2$, en la que si las presiones parciales se expresan en atmósferas la velocidad viene en kmol/m³·h.

REACTOR

TIPO: RFP, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dl}{dX} = \cdot \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot X$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow A_3 + A_4$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$\Delta H_k^0 = -26800$ kcal/kmol

$\overline{C}_{p_1} = 8.6$ kcal/kmol·K ; $\overline{C}_{p_2} = 25.3$ kcal/kmol·K

$\overline{C}_{p_3} = 28$ kcal/kmol·K ; $\overline{C}_{p_4} = 7.2$ kcal/kmol·K

CINÉTICA: $r = 206 \cdot 10^6 \cdot \exp\left[\frac{-14233}{T}\right] \cdot p_1 \cdot p_2$ (kmol/m^3·h) si p (atm)

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR /SALIDA
T_0 = 200 °C = 473 K	D = 5” = 0.127 m
$F_{t0} = 0.17 \cdot 10^{-3}$ kmol/h	T* = 546 K
$x_{10} = 0.2$, $x_{20} = 0.8$	*a*) L_{max} = ?
$P = P_0 = 2$ atm	

RESULTADOS

SOLUCIÓN: L = 17.6 m

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

Problema 4.07. La reacción en fase líquida $A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$ se lleva a cabo en un RFP multitubular no isotermo. Los tubos del reactor (de 7 m de longitud y 2 cm de diámetro) están rodeados por un refrigerante que mantiene constante la temperatura de la pared. La reacción es de pseudoprimer orden con respecto a A_1, siendo la constante de velocidad en s^{-1}:

$$k = 4.03 \cdot 10^5 \cdot \exp\left[\frac{-5624}{T}\right]$$

El caudal másico es constante y vale 0.06 kg/s; la densidad del sistema es constante y vale 1025 kg/m^3. La temperatura del alimento puede ser 350, 365, 400 y 425 K.

Calcular y dibujar el perfil de T y X a lo largo de la longitud del RFP cuando la temperatura de la pared de los tubos es 350 K.

Datos y notas

$C_{10} = 0.50\ kmol/m^3$
$\Delta H_k^0 = -210000$ kJ/mol; $C_{p,\text{fase líquida}} = 4.2$ kJ/kg · K
Coeficiente global de transmisión de calor: 1.59 kJ/s · m^2 · K

REACTOR

TIPO: RFP
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dl}{dX} = \cdot \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r} \cdot \frac{St \cdot (T_f - T)}{R_h}$, donde

$$St = \frac{U \cdot A_s \cdot R_h}{F_{k_0} \cdot \sum \theta_j \bar{C}_{p_j}} \quad \text{y} \quad R_h = \frac{S}{A_s} = \frac{D}{4}$$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$

$\rho = 1025\ kg/m^3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_1^0 = -210000 \text{ kJ/kmol}$$

$$\overline{C}p_{\text{fase liquida}} = 4.2 \text{ kJ/kg} \cdot \text{K}$$

CINÉTICA:

$$r = k \cdot c_1$$

$$k = 4.03 \cdot 10^5 \cdot \exp\left[\frac{-5624}{T}\right] \ (s^{-1})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR /SALIDA
$T_0 = 350$ K	L = 7 m
$M_{t0} = 0.06$ kg/s	D = 2 cm ≡ 0.02 m
$c_{10} = 0.5$ kmol/m3	*a)* ¿X = f(T)?, ¿X = f(L)?, ¿T = f(L)?,

INTERCAMBIADOR: $U = 1.59 \text{ kJ/s} \cdot m^2 \cdot K \quad ; \quad T_f = \begin{cases} 350 \text{ K} \\ 365 \text{ K} \\ 400 \text{ K} \\ 425 \text{ K} \end{cases}$

RESULTADOS

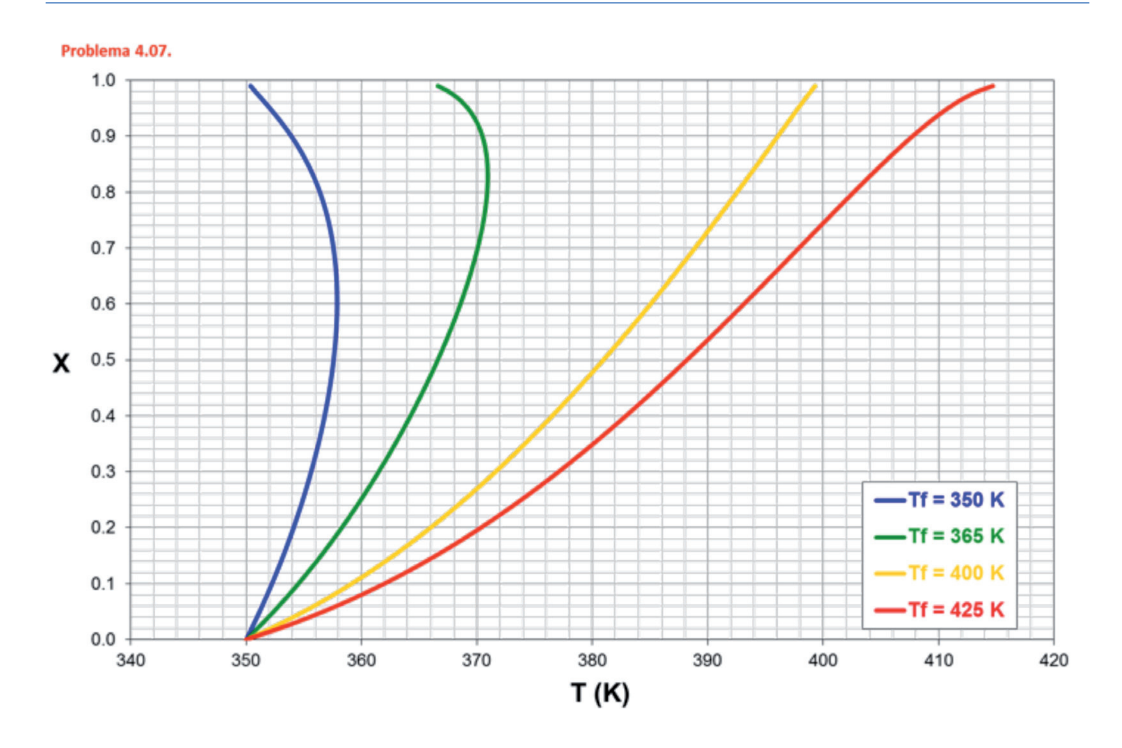


Figura 4.12. Evolución del grado de conversión con la temperatura de reacción: X = f(T)

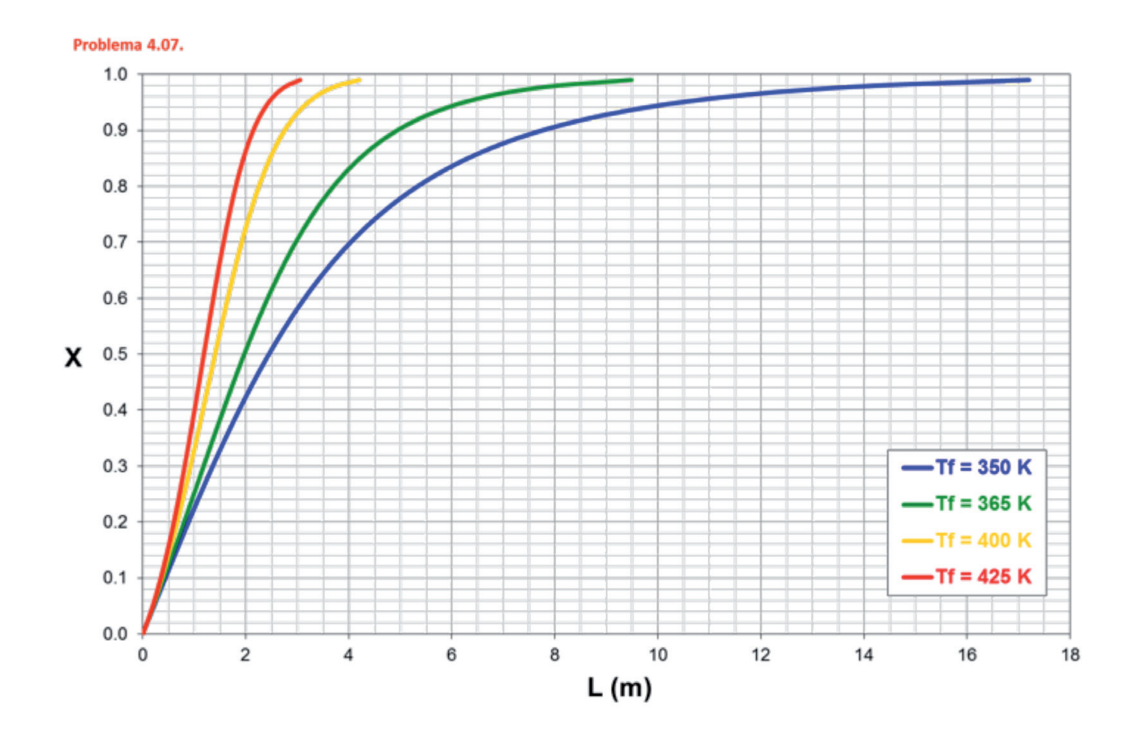


Figura 4.13. Evolución del grado de conversión con la longitud del reactor: X = f(L)

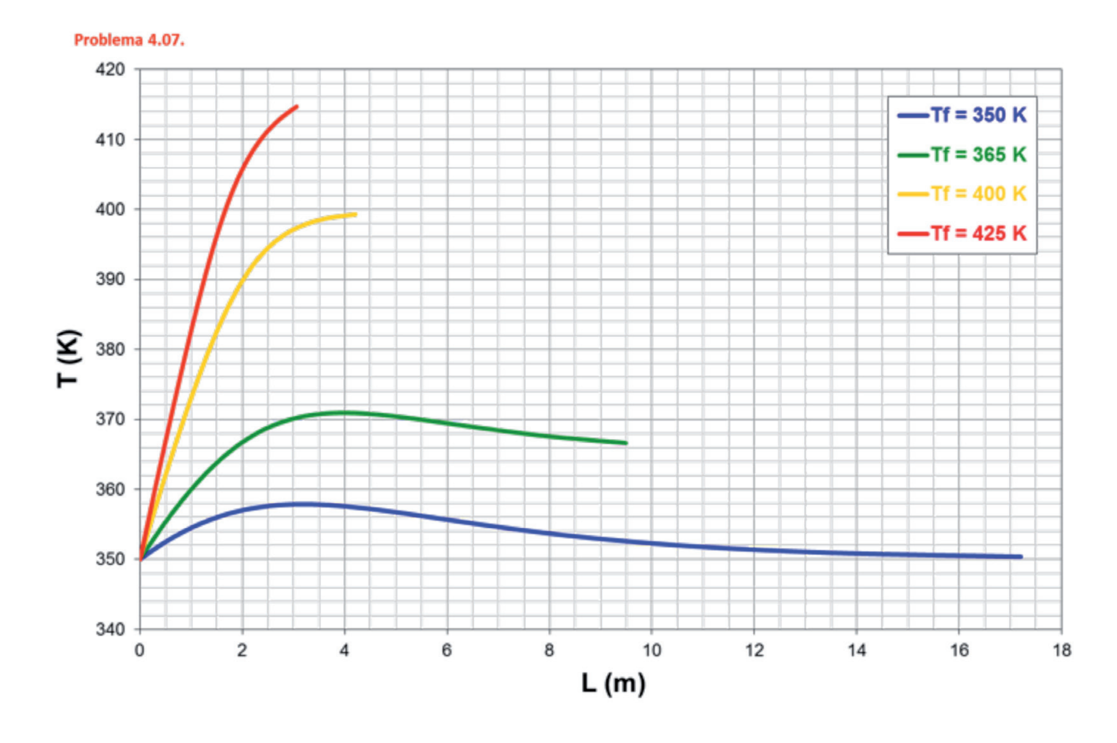


Figura 4.14. Evolución de la temperatura de reacción con la longitud del reactor: T = f(L)

SOLUCIÓN: X = f(T), X = f(L) y T = f(L) (ver figuras 4.12., 4.13. y 4.14.)

Problema 4.08. La reacción irreversible $2A_1 + A_2 \rightarrow A_3$ de segundo orden con respecto a A_1 y de orden cero con respecto a A_2, tiene lugar en fase gas en el interior de un horno cilíndrico, cuyas paredes se encuentran a 1600 K. Se alimenta una mezcla gaseosa, a 1500 K, con un caudal molar total de 9072 mol/h; la composición de esta mezcla es 40 % de A_1, 40 % de A_2 y 20 % de un gas inerte (porcentajes volumétricos). La presión total del sistema se mantiene constante e igual a 5 atmósferas.

Deducir el sistema de ecuaciones diferenciales y calcular la evolución del grado de conversión y de la temperatura de la mezcla reaccionante con el volumen del reactor (perfil V, T, X).

Datos y notas

$\Delta H_k^0 = 58110$ J/mol; $C_{p,1} = C_{p,2} = 33.2$ J/mol · K; $C_{p,3} = 41.5$ J/mol · K; $C_{p,inerte} = 28.8$ J/mol · K

$$k = 9.442 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left[\frac{-30000}{T}\right] \quad (\text{l/mol} \cdot \text{h})$$

Coeficiente global de transmisión de calor: 670 J/h·l·K (obsérvese que este coeficiente viene referido por unidad de volumen (l) y no por unidad de área (m^2) como suele ser habitual).

REACTOR

TIPO: RFP
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dV}{dX} = \cdot \frac{F_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r} \cdot \frac{St \cdot (T_f - T)}{R_h}$, donde

$$St = \frac{U \cdot A_s \cdot R_h}{F_{k_0} \cdot \sum \theta_j C_{p_j}} \quad y \quad R_h = \frac{S}{A_s} = \frac{D}{4}$$

REACCIÓN

ESQUEMA: $2A_1 + A_2 \xrightarrow{A_4} A_3$

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_1^0 = 58110 \ \text{J/mol}$$

$$\overline{C}_{p_1} = \overline{C}_{p_2} = 33.2 \ \text{J/mol}\cdot\text{K} \ ; \ \overline{C}_{p_3} = 41.5 \ \text{J/mol}\cdot\text{K} \ ; \ \overline{C}_{p_4} = 20.8 \ \text{J/mol}\cdot\text{K}$$

CINÉTICA:

$$r = k \cdot c_1^2$$

$$k = 9.442 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left[\frac{-30000}{T}\right] \ (\text{l/mol}\cdot\text{h})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR /SALIDA
$T_0 = 1500$ K $F_{t0} = 9072$ mol/h $x_{10} = 0.40$, $x_{20} = 0.40$, $x_{40} = 0.20$ $P_0 = P = 5$ atm	*a)* ¿X = f(V)?, ¿T = f(V)?

INTERCAMBIADOR: $T_f = 1600$ K

$$U = 670 \ \text{J/h}\cdot\text{l}\cdot\text{K}$$

RESULTADOS

Problema 4.08.

Figura 4.15. Evolución del grado de conversión con la temperatura de reacción: X = f(T)

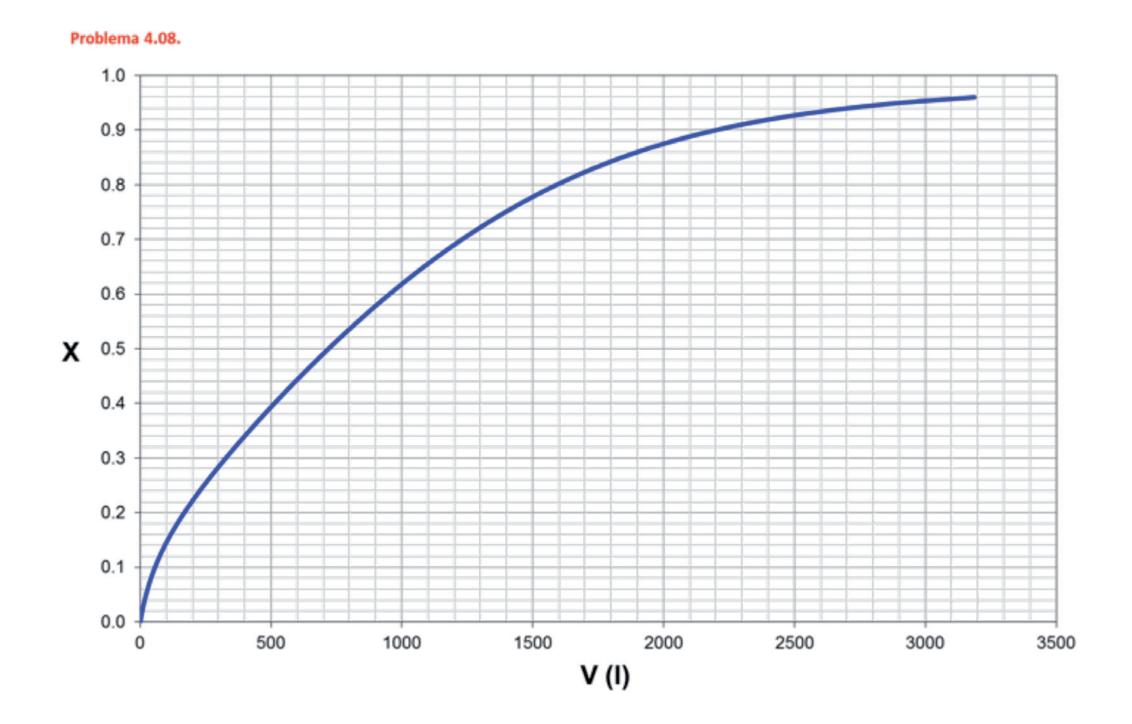


Figura 4.16. Evolución del grado de conversión con el volumen del reactor: X = f(V)

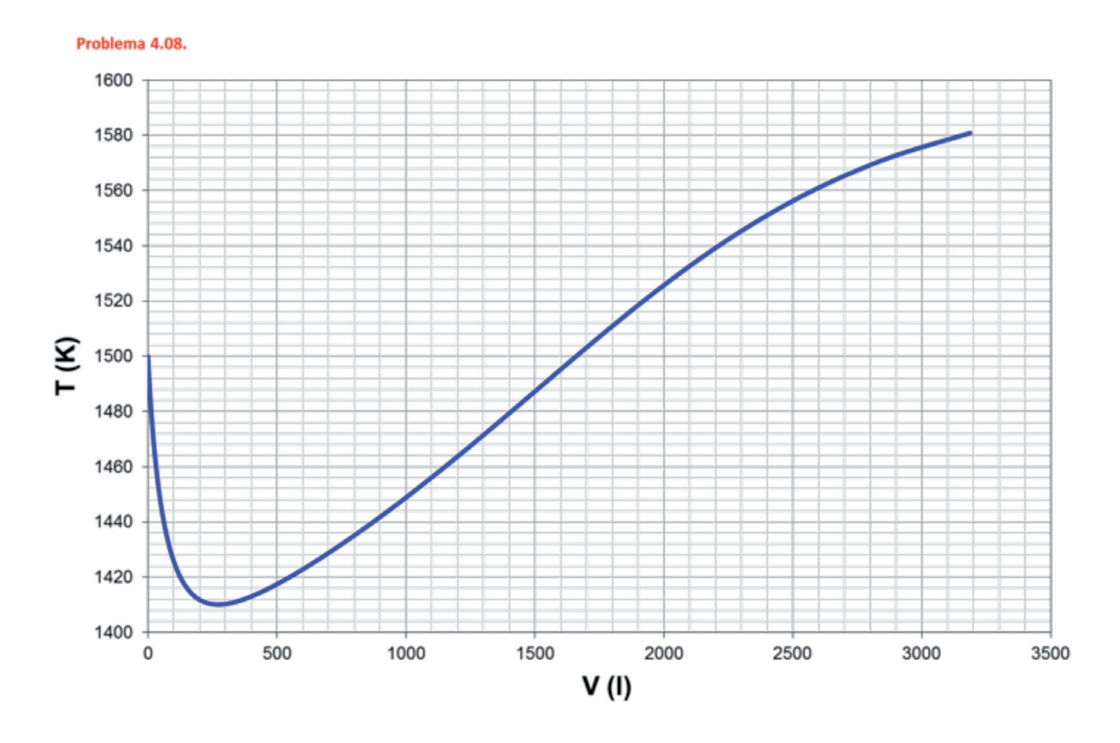


Figura 4.17. Evolución de la temperatura de reacción con el volumen del reactor: T = f(V)

SOLUCIÓN: *a*) X = f(T), X = f(V) y T = f(V) (ver figuras 4.15., 4.16. y 4.17.)

Problema 4.09. Jeffreys estudió el diseño de una instalación para fabricar anhídrido acético y observó que una de las etapas clave era el craqueo en fase vapor de la acetona para producir cetena y metano, según el esquema de reacción $CH_3-CO-CH_3 \rightarrow H_2C=C=O+CH_4$. Además llegó a la conclusión de que esta reacción era irreversible y de primer orden con respecto a la acetona, obteniendo que la constante de velocidad variaba con la temperatura según la expresión:

$$\ln k = 34.34 - \frac{34222}{T}$$

donde la temperatura va en grados Kelvin y la constante de velocidad en s^{-1}.

Para llevar a cabo esta reacción se dispone de un RFP al que se alimenta 8000 kg/h de acetona a 1035 K y 162 kPa. El interior del RFP está constituido por 1000 tubos que están en contacto con una corriente de gas (que se encuentra a una temperatura de 1150 K y se mantiene constante) que aporta la energía necesaria para que la reacción endotérmica tenga lugar.

Calcular el perfil del grado de conversión (X) y temperatura (T) para la mezcla reactante a lo largo del reactor.

Datos y notas

$\Delta H^0_{acetona}$ = –216670 kJ/kmol; ΔH^0_{cetena} = –61090 kJ/kmol; ΔH^0_{metano} = –74810 kJ/mol

Capacidades caloríficas:

$$C_{p,acetona} = 26.63+0.183\cdot T-45.86\cdot 10^{-6}\cdot T^2 \text{ kJ/kmol}\cdot K$$

$$C_{p,cetena} = 20.04+0.0945\cdot T-30.95\cdot 10^{-6}\cdot T^2 \text{ kJ/kmol}\cdot K$$

$$C_{p,metano} = 13.39+0.077\cdot T-18.71\cdot 10^{-6}\cdot T^2 \text{ kJ/kmol}\cdot K$$

Dimensiones de cada tubo: $D_{exterior}$ = 0.0334 m y $D_{interior}$ = 0.0266 m
Coeficiente global de transmisión de calor referido al área interna de los tubos: 0.110 kJ/s · m² · K.

REACTOR

TIPO: RFP
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dl}{dX} = \cdot \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k)\cdot r}\cdot\frac{St\cdot(T_f - T)}{R_h}$, donde

$$St = \frac{U}{G_{k_0}\cdot\sum\theta_j\overline{C}_{p_j}} \quad y \quad R_h = \frac{D}{4}$$

REACCIÓN

ESQUEMA:

$$CH_3-CO-CH_3 \rightarrow H_2C=C=O+CH_4$$

$$A_1 \rightarrow A_2 + A_3$$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$$\Delta H_1^0 = -216670 \text{ kJ/kmol} \;;\; \overline{C}_{p_1} = 26.63+0.183\cdot T-45.86\cdot10^{-6}\cdot T^2 \text{ kJ/kmol}\cdot K$$

$$\Delta H_2^0 = -61090 \text{ kJ/kmol} \;;\; \overline{C}_{p_2} = 20.04+0.0945\cdot T-30.95\cdot10^{-6}\cdot T^2 \text{ kJ/kmol}\cdot K$$

$$\Delta H_3^0 = -74810 \text{ kJ/kmol} \;;\; \overline{C}_{p_3} = 13.39+0.077\cdot T-18.71\cdot10^{-6}\cdot T^2 \text{ kJ/kmol}\cdot K$$

CINÉTICA:

$$r = k\cdot c_1$$

$$\ln k = 34.34 - \frac{34222}{T} \quad (T \text{ en } K \text{ y } k \text{ en } s^{-1})$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR /SALIDA
T_0 = 1035 K	1000 tubos
m_{10} = 8000 kg/h	D_i = 0.0266 m
P_0 = 162 kPa = 162·10^{-3} Pa	D_e = 0.0334 m
M_1 = 58 kg/kmol	*a)* ¿X = f(L)?, ¿T = f(L)?

INTERCAMBIADOR: $T_f = cte = 1150 \text{ K}$

$$U_{interior} = 0.110 \text{ KJ/s}\cdot m^2\cdot K$$

A. Barba Juan / C. Clausell Terol - ISBN: 978-84-697-1981-7 Problemas resueltos de reactores químicos y bioquímicos - UJI - DOI: http://dx.doi.org/10.6035/Sapientia99

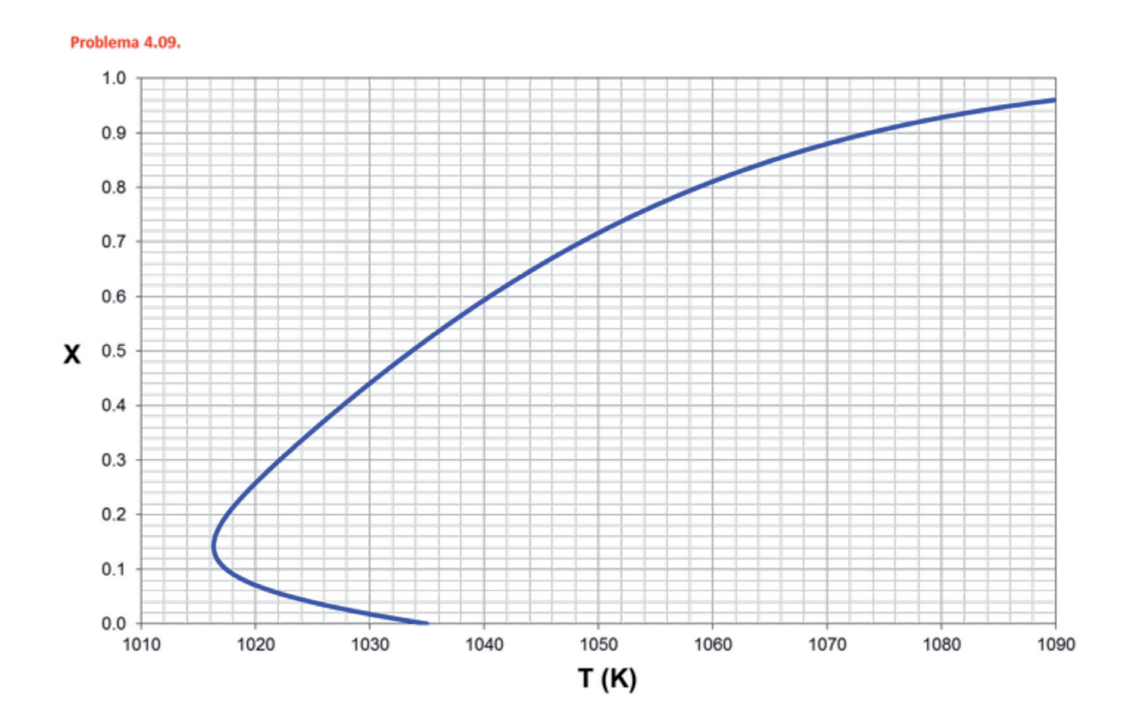


Figura 4.18. Evolución del grado de conversión con la temperatura de reacción: X = f(T)

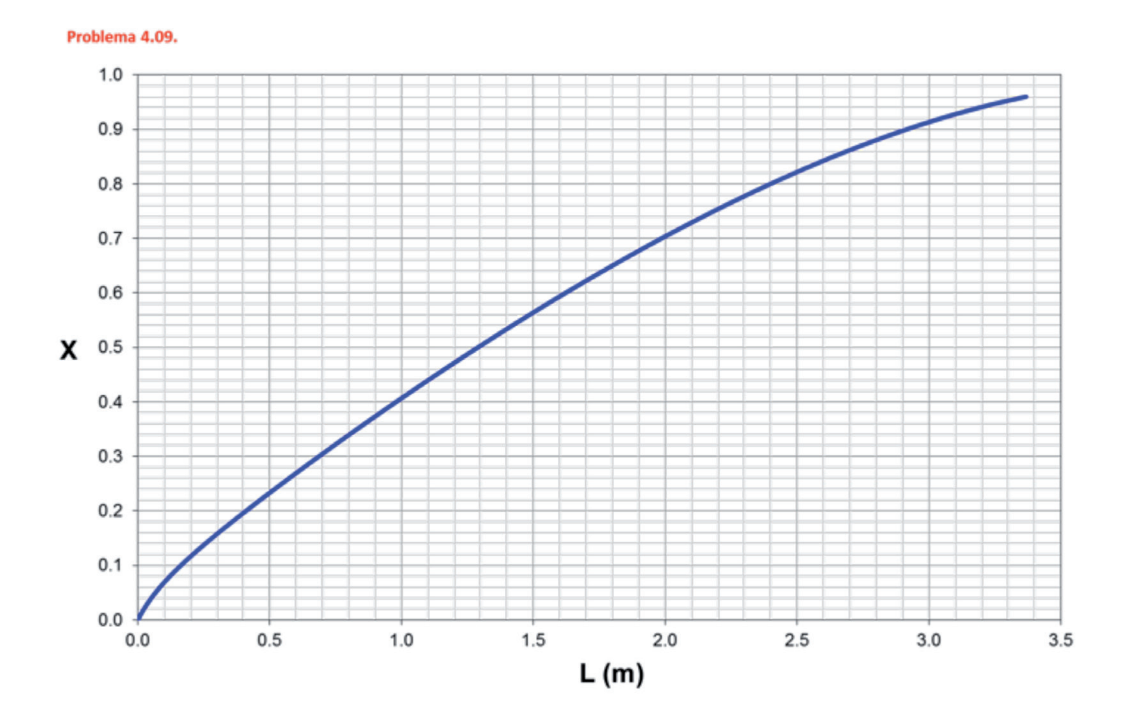


Figura 4.19. Evolución del grado de conversión con la longitud del reactor: X = f(L)

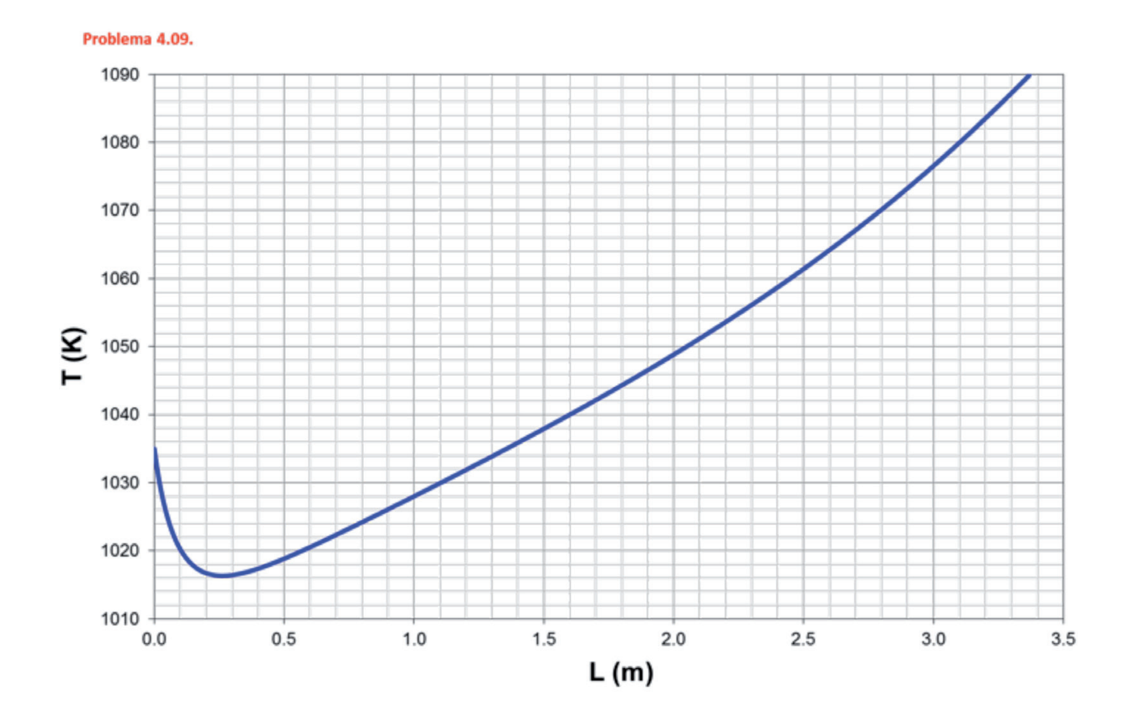


Figura 4.20. Evolución de la temperatura de reacción con la longitud del reactor: T = f(L)

SOLUCIÓN: ***a***) **X = f(T), X = f(L) y T = f(L) (ver figuras 4.18., 4.19. y 4.20.)**

Problema 4.10. Se dispone de un RFP industrial que se calienta mediante una camisa de vapor de agua (que condensa a 114 °C). El diámetro interno del reactor es de 10''. Se pretende desarrollar una reacción irreversible de primer orden, en fase líquida, que responde al esquema de reacción $A_1 \rightarrow \text{productos}$. Al reactor entra una corriente de A_1 puro, a 75 °C, con un caudal másico de 4540 kg/h.

Calcular la longitud del reactor para alcanzar una conversión del 0.5.

Datos y notas

Densidad media de la mezcla reactiva: 1280 kg/m^3
M_1 = 200 kg/kmol
ΔH_k^0 = 93000 kJ/mol; $C_{p,medio}$ = 3138 J/kg · K

$$k = 203 \cdot 10^{15} \cdot \exp\left[\frac{-13940}{T}\right] \quad (h^{-1})$$

Coeficiente global de transmisión de calor referido al diámetro interno del reactor: 2270 J/s · m^2 · K.

REACTOR

TIPO: RFP
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\frac{dl}{dX} = \cdot \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $\frac{dT}{dX} = J + \frac{G_{k_0}}{(-\nu_k) \cdot r} \cdot \frac{St \cdot (T_f - T)}{R_h}$, donde

$St = \frac{U}{G_{k_0} \cdot \sum \theta_j \overline{C}_{p_j}}$ y $R_h = \frac{D}{4}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

$M_1 = 200$ kg/kmol

$\rho_{media} = 1280$ kg/m^3

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

$\Delta H_K^0 = 93000$ kJ/kmol

$\overline{C}_{p_{medio}} = 3138$ J/kg·K

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1$

$k = 203 \cdot 10^{15} \cdot \exp\left[\frac{-13940}{T}\right]$ (h^{-1})

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTOR /SALIDA
$x_{10} = 1$	D = 10” = 0.254 m
$T_0 = 75$ °C = 348 K	X = 0.5
$m_{10} = 4540$ kg/h	*a*) L = ?

INTERCAMBIADOR: $T_f = cte = 114$ °C = 387 K

$U = 2270$ J/s·m^2·K = 8172 kJ/ h·m^2·K

RESULTADOS

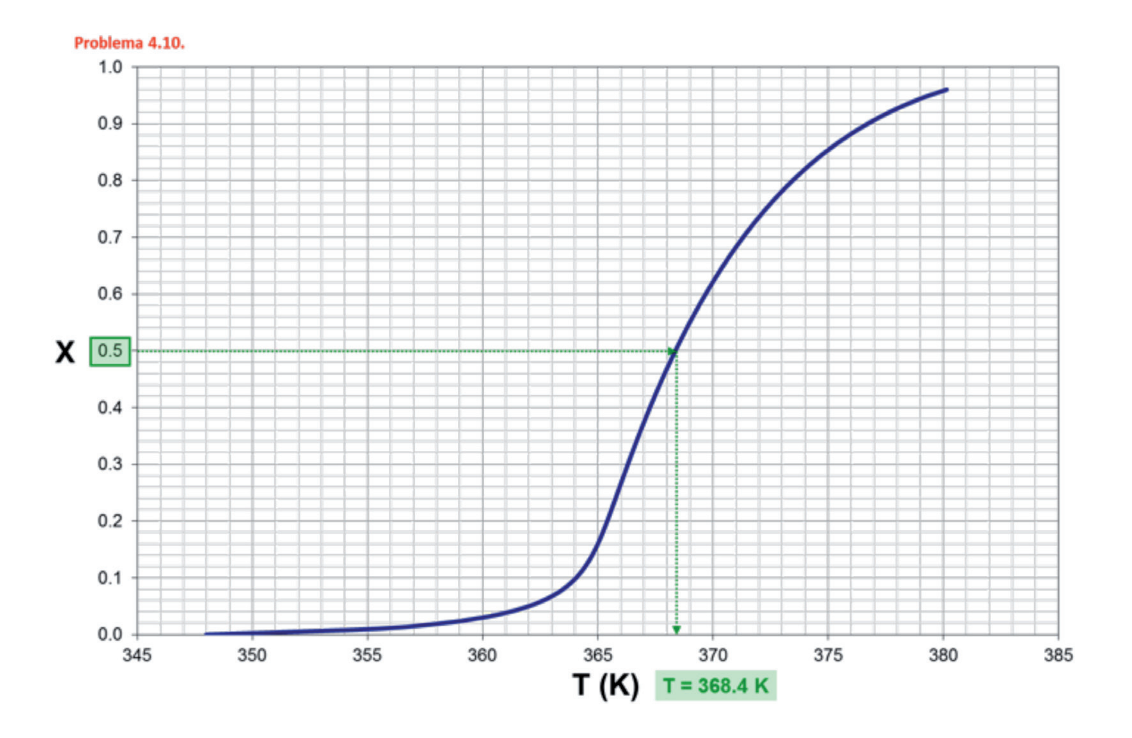


Figura 4.21. Evolución del grado de conversión con la temperatura de reacción: X = f(T)

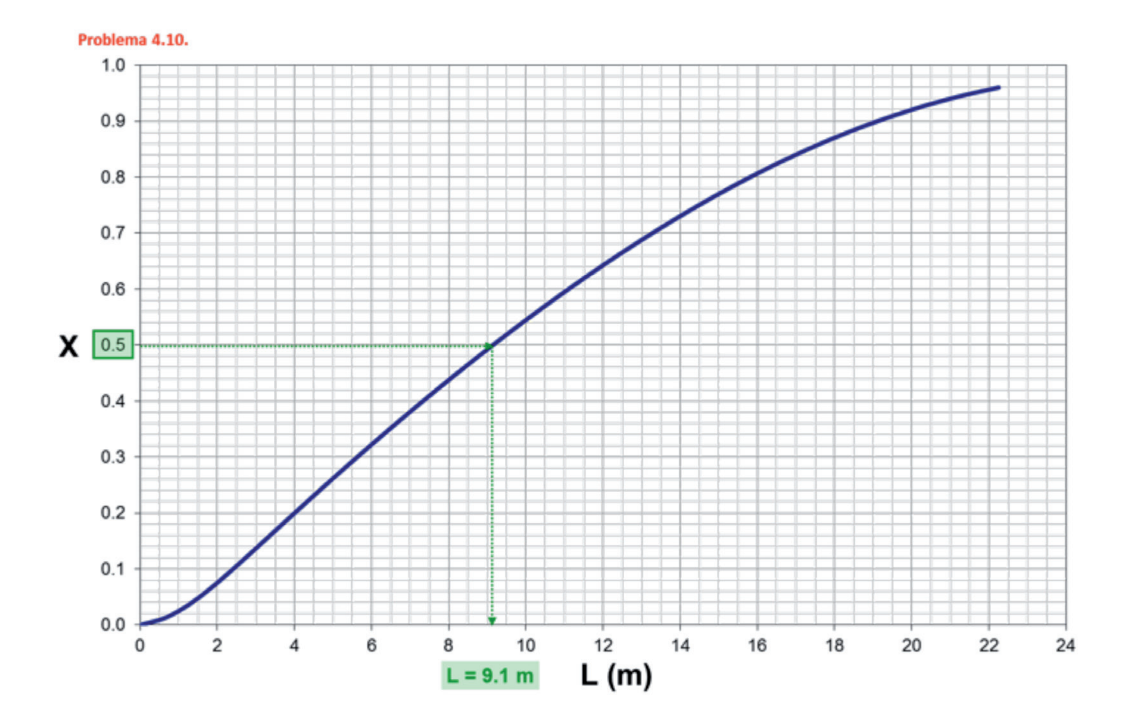


Figura 4.22. Evolución del grado de conversión con la longitud del reactor: X = f(L)

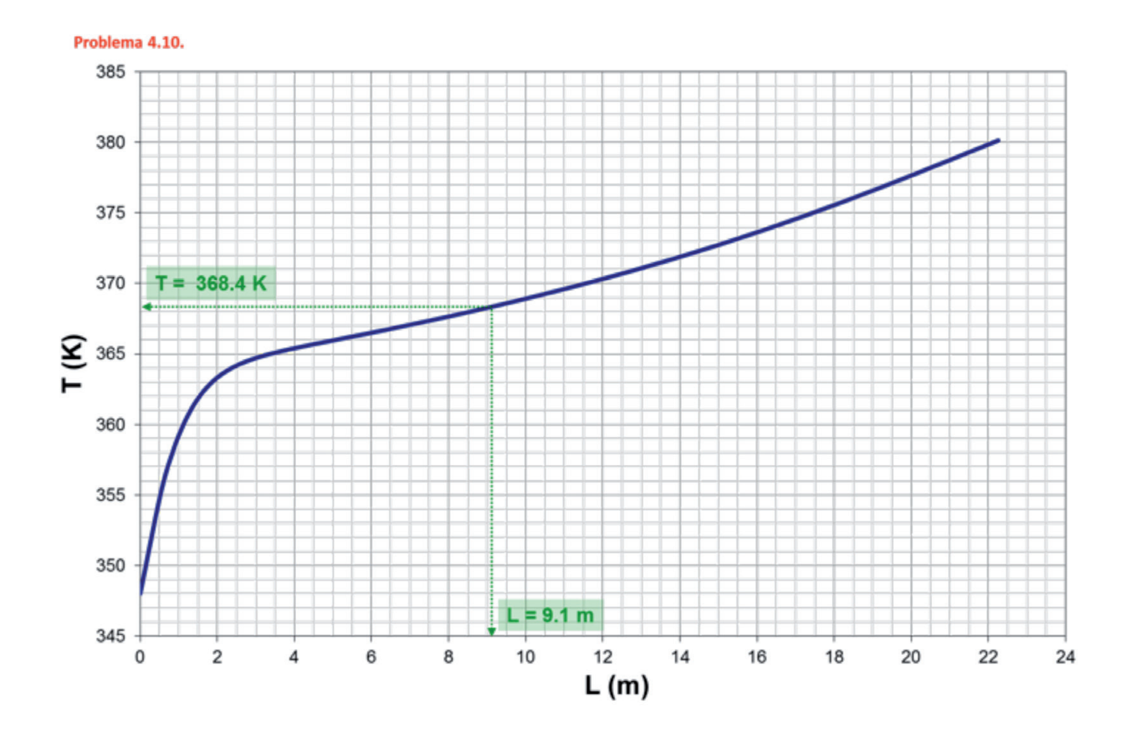


Figura 4.23. Evolución de la temperatura de reacción con la longitud del reactor: T = f(L)

SOLUCIÓN: L = 9.1 m

CAPÍTULO 5

Asociación de reactores continuos

Problema 5.01. Se desea llevar a cabo la reacción elemental reversible $2A_1 \leftrightarrow A_2 + A_3$ en uno o más RCTA conectados en serie. El alimento se introduce con un caudal de 3.5 m^3/h, exento de A_2 y A_3, y con una concentración de A_1 de 48 $kmol/m^3$. Calcular:

a) el tamaño de reactor que se requiere si las concentraciones finales de A_2 y A_3 han de ser iguales al 85 % de las de equilibrio;
b) el número de RCTA en serie requeridos para alcanzar el grado de conversión deseado si los recipientes de que se dispone tienen un volumen igual al 5 % de la capacidad del reactor único;
c) una vez en funcionamiento el conjunto de reactores determinado en el apartado anterior, hay que separar uno para proceder a su reparació. ¿En qué medida habrá que modificar el caudal volumétrico para seguir manteniendo la conversión deseada?

Datos y notas

La constante de velocidad de la reacción directa, a la temperatura de reacción (que es la misma para todos los reactores), vale $2 \cdot 10^{-4}$ $m^3/kmol \cdot s$ y la constante de equilibrio es igual a 16.

REACTOR

TIPO: 1 ó varios RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\begin{cases} c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0 \\ c_{k_0} \cdot (\Delta X)_n + \nu_k \cdot r_n \cdot \tau = 0 \end{cases}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $2A_1 \Leftrightarrow A_2 + A_3$

CINÉTICA: $k = 2 \cdot 10^{-4}\ \ m^3/kmol \cdot s$

$K = 16$

$$r = k \cdot c_1^2 - k' \cdot c_2 \cdot c_3 = k \cdot c_1^2 - \frac{k}{K} \cdot c_2 \cdot c_3$$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	1 REACTOR	N REACTORES
$Q_{v0} = 3.5\ m^3/h = 9.72 \cdot 10^{-4}\ m^3/s$	$c_2 = 0.85 \cdot c_{2e} = 18.14\ kmol/m^3$	$V = 0.05 \cdot V_R$
$c_{10} = 48\ kmol/m^3$	$c_3 = 0.85 \cdot c_{3e} = 18.14\ kmol/m^3$	$X_N = 0.756$
	$X = c_2/24 = 0.756$	*b*) Nº RCTA = ?
	a) V_R = ?	*c*) Nº RCTA = 5

RESULTADOS

→ Apartado *b*

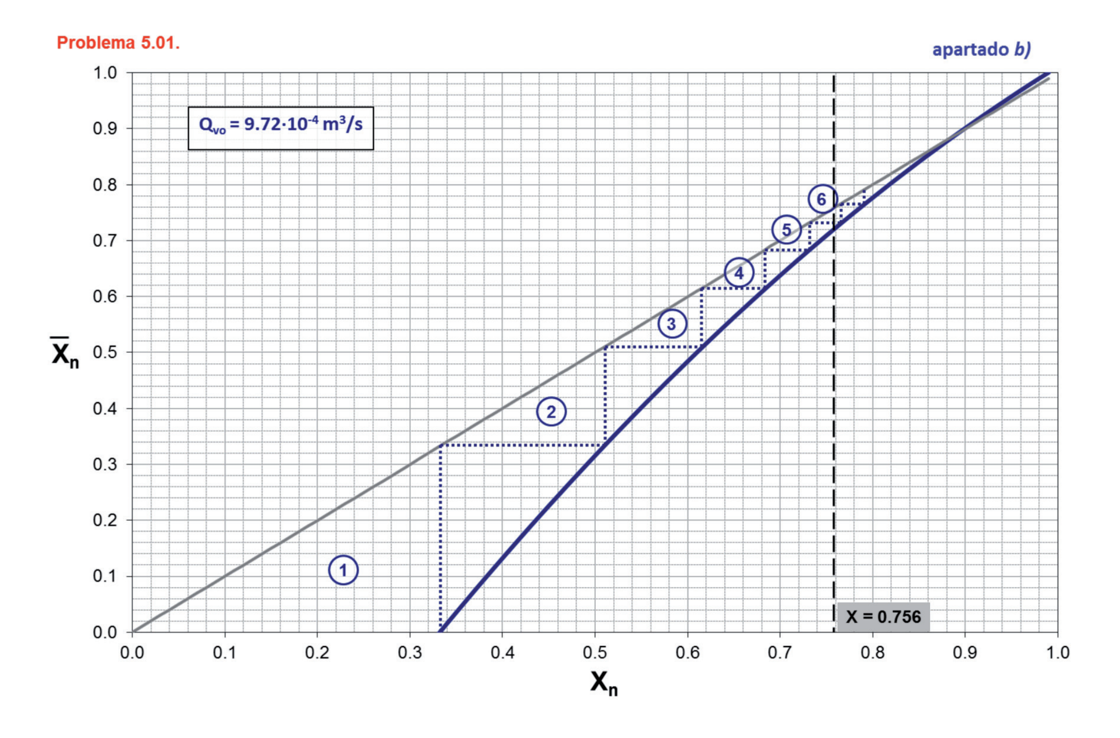


Figura 5.1. Cálculo del número de RCTA por el método de Aris: apartado *b*

→ Apartado *c*

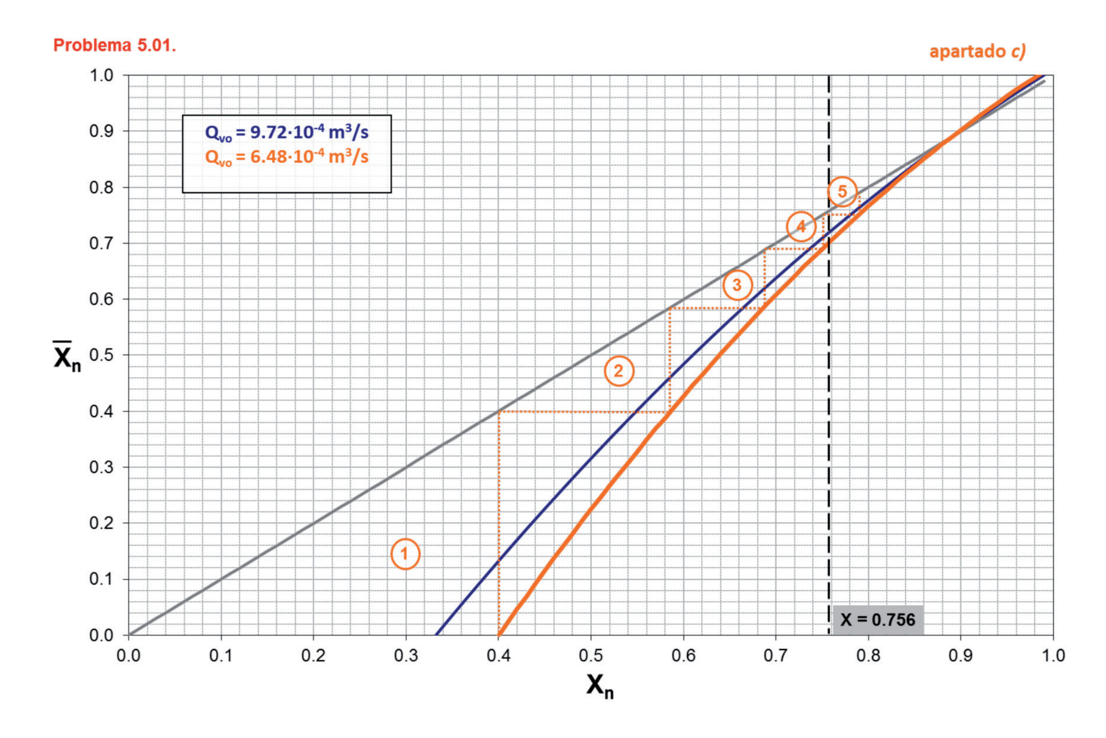


Figura 5.2. Cálculo del caudal volumétrico inicial (Q_{v0}) utilizando el método de Aris: apartado *c*

SOLUCIÓN: ***a*) $V_R = 0.76\ m^3$**

***b*) Nº RCTA = 6**

***c*) $Q_{v0} = 6.48 \cdot 10^{-4}\ m^3/s$**

Problema 5.02. En dos RCTA en serie de igual volumen tiene lugar una reacción endotérmica irreversible en fase líquida, entre los reactivos A_1 y A_2. La reacción es de segundo orden. Cada reactor va provisto de una camisa de vapor de calefacción. Calcular la relación entre las áreas de las dos camisas de calefacción que se requiere para que la temperatura de los tanques sea la misma, a igualdad de velocidad de agitación y demás variables que afecten al coeficiente de transmisión de calor.

Datos y notas

En unidades autoconsistentes el volumen de cada reactor es 10^4, la constante de velocidad 10^{-2}, el caudal molar de alimentación de cada reactivo 5, el caudal volumétrico de la solución 12 y la temperatura de alimentación igual a la de reacción.
La temperatura de condensación del vapor de calefacción en ambos reactores es la misma.

REACTOR

TIPO: 2 RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot (\Delta X)_n + \nu_k \cdot r_n \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $Q_n = T_n - \overline{T}_n - J \cdot (\Delta X)_n$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$

TERMODINÁMICA: ENDOTÉRMICA

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 \cdot c_2$
$k = 10^{-2}$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	RCTA 1	RCTA 2
$F_{10} = F_{20} = 5$	$V_1 = 10^4$	$V_2 = 10^4$
$Q_{v0} = 12$	T_1	T_2
$\overline{T}_1 = \overline{T}_2 = T_1 = T_2$		
$c_{10} = c_{20} = F_{10}/Q_{v0} = 5/12 = 0.417$		*a)* $(A_1/A_2) = ?$

INTERCAMBIADOR: $U_1 = U_2$
$T_{f1} = T_{f2}$

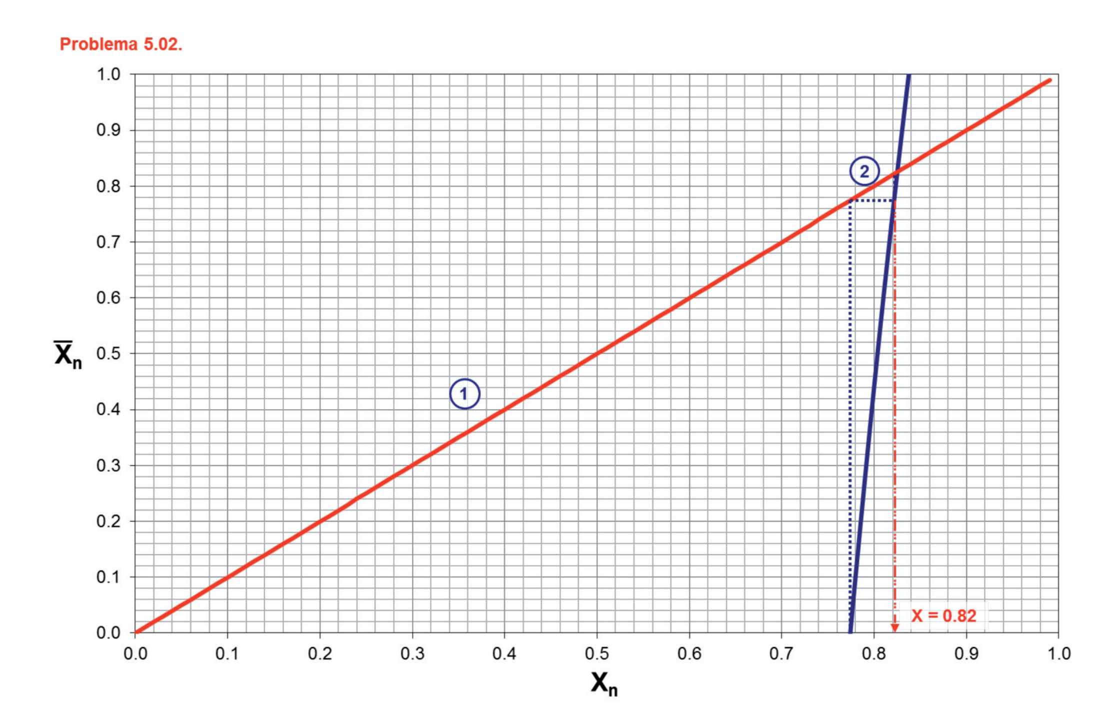


Figura 5.3. Cálculo de los grados de conversión de la serie de RCTA por el método de Aris

SOLUCIÓN: $A_1/A_2 = 17.2$

Problema 5.03. Se desea diseñar una serie de dos RCTA para alcanzar una conversión final de 0.85, cuando se desarrolle la reacción en fase líquida, irreversible, de segundo orden $A_1 \rightarrow$ productos. Las opciones de diseño, teniendo en cuenta que los dos RCTA operarán a la misma temperatura, son:

a) dos RCTA en serie, del mismo tamaño

b) dos RCTA en serie, de tamaño tal que el volumen total de reacción sea mínimo

El coste de cada RCTA es 290 €/m^3, pero se aplica un descuento del 10 % en el caso de que los RCTA sean del mismo tamaño y geometría.

¿Cuál de las dos opciones de diseño supone una inversión menor?

Datos y notas

k = 0.075 m^3/kmol · min (a la temperatura de reacción)
Q_{V0} = 0.025 m^3/min
c_{10} = 0.040 kmol/m^3

REACTOR

TIPO: 2 RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot (\Delta X)_n + \nu_k \cdot r_n \cdot \tau = 0$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1^2$

$k = 0.075\ m^3/kmol \cdot min$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	2 RCTAs
$Q_{v0} = 0.025\ m^3/min$	$X = 0.85$
$c_{10} = 0.040\ kmol/m^3$	$T_1 = T_2$
	a) 2 RCTA de $V_1 = V_2$
	b) 2 RCTA de $V_1 \neq V_2$ y $V_1 + V_2 = min$

RESULTADOS

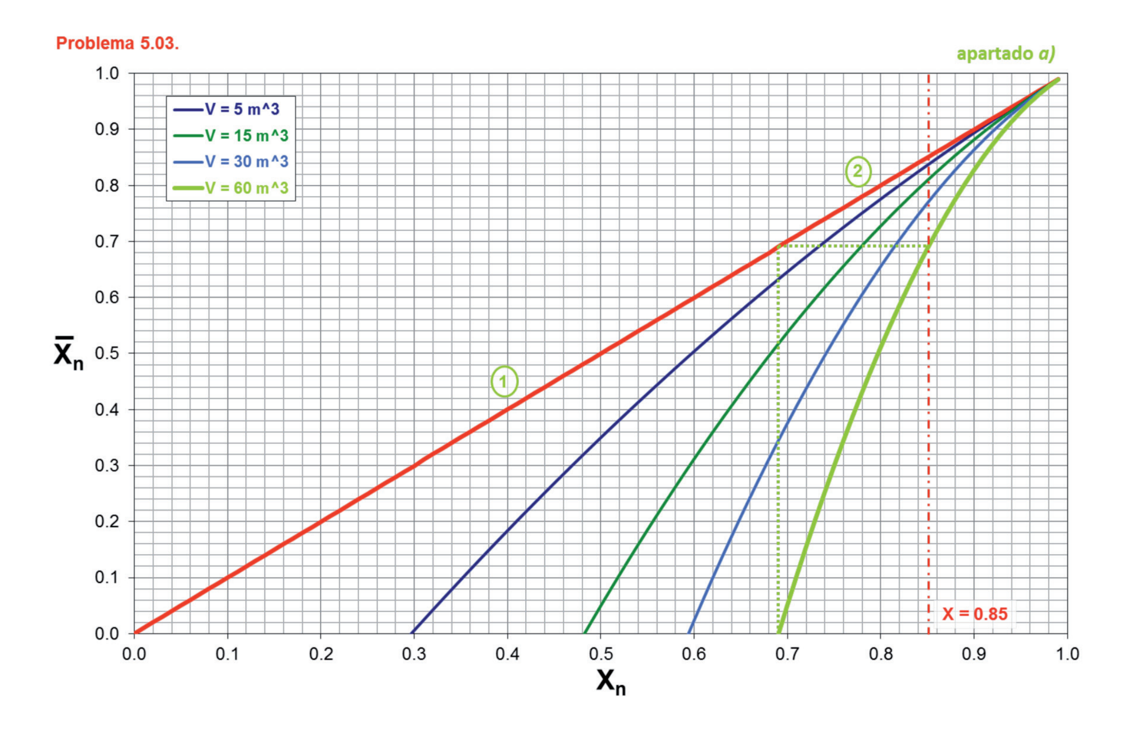


Figura 5.4. Cálculo del número de RCTA por el método de Aris: apartado *a*

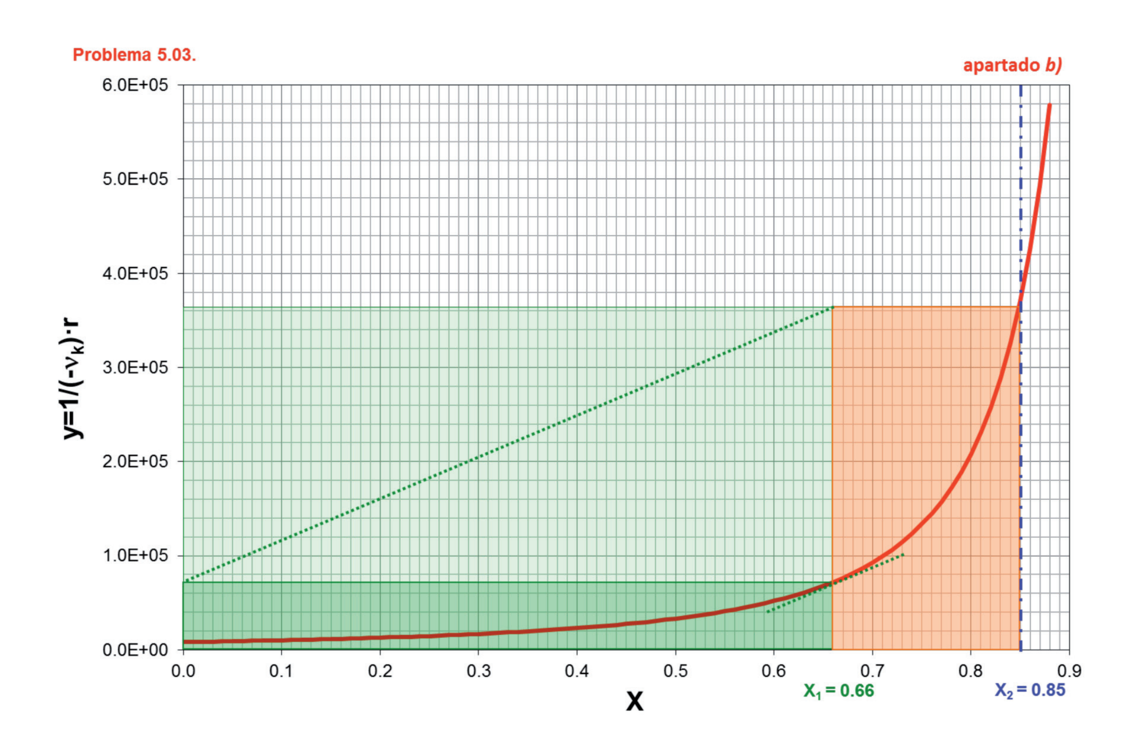


Figura 5.5. Cálculo del volumen de los RCTA: apartado *b*

SOLUCIÓN:	***a*) Coste total = 31200 €**
	***b*) Coste total = 34220 €**

Problema 5.04. Un conjunto de 6 RCTA de igual tamaño, conectados en serie, se utiliza para desarrollar a escala industrial la reacción de descomposición de un reactivo A_1 en disolución. La reacción es de primer orden e irreversible y todos los RCTA operan a la misma temperatura. Bajo determinadas condiciones de operación, la corriente que sale del último reactor tiene una concentración igual al 5 % de la que se alimenta al primer reactor. Debido a un inadecuado funcionamiento del primer reactor de la serie, éste se inutiliza, introduciendo el alimento en el segundo reactor.

a) ¿Cuál será el valor de la concentración de reactivo A_1 en la corriente de salida del último reactor, si se mantiene el mismo caudal de alimentación que en el primer caso?
b) ¿Qué caudal de alimentación conducirá a la misma composición de la corriente de salida que se tenía originalmente?

Datos y notas

A las condiciones de operación: $k = 10\ h^{-1}$; $c_{10} = 1\ kmol/m^3$.

REACTOR

TIPO: 6 RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $\begin{cases} c_{k_0} \cdot (\Delta X)_n + \nu_k \cdot r_n \cdot \tau = 0 \\ c_{j_{n-1}} - c_{j_n} + \nu_j \cdot r_n \cdot \tau = 0 \end{cases}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \rightarrow A_2$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1$

$k = 10\ h^{-1}$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	6 ó 5 RCTAs
$c_{10} = 1\ kmol/m^3$	$c_{A6} = 0.05 \cdot c_{A0}$ *a*) $c_{A5} = ?$ (5 RCTA, para Q_{v0} = 6 RCTA) *b*) $Q_{v0} = ?$ (5 RCTA, para $c_{A5} = 0.05 \cdot c_{A0}$)

RESULTADOS

SOLUCIÓN: ***a*) $c_{A5} = 0.083\ kmol/m^3$**

***b*) $(Q_{v0})_5 = 0.79 \cdot (Q_{v0})_6$**

Problema 5.05. Wassermann y sus colaboradores estudiaron la reacción de adición del tipo Diels-Alder entre la benzoquinona y el ciclopentadieno para dar un aducto $A_1 + A_2 \rightarrow$ productos. El estudio lo llevaron a cabo a 25 °C y comprobaron que se trata de una reacción irreversible y elemental en la que se pueden despreciar los cambios de volumen y con una constante de velocidad de $9.92 \cdot 10^{-3}$ m^3/kmol·s. Se desea desarrollar esta reacción en un RCTA, a 25 °C, con una corriente alimento de caudal $2.78 \cdot 10^{-4}$ m^3/s en la que la concentración de benzoquinona y ciclopentadieno son, respectivamente, 0.08 y 0.1 kmol/m^3.

a) Calcular el volumen de reacción para conseguir un grado de conversión de 0.875.
b) Para disminuir el volumen de reacción obtenido en el apartado anterior se piensa sustituir dicho RCTA por una batería de 3 RCTA (todos ellos del mismo volumen y operando a 25 °C). Calcular, utilizando el método de Jones, el volumen de cada uno de estos RCTA, el volumen total de reacción y los grados de conversión a la salida de cada RCTA.

REACTOR

TIPO: 1 ó 3 RCTA
Nº REACCIONES: 1
FASE: V = cte

BALANCE DE MATERIA: $\begin{cases} c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0 \\ c_{k_0} \cdot (\Delta X)_n + \nu_k \cdot r_n \cdot \tau = 0 \end{cases}$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + A_2 \rightarrow A_3$

CINÉTICA: $r = k \cdot c_1 \cdot c_2$

$k = 9.92 \cdot 10^{-3}\ m^3/kmol \cdot s$

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	1 ó 3 RCTAs
$Q_{v0} = 2.78 \cdot 10^{-4}\ m^3/s$	T = 25 °C = 298 K
$c_{10} = 0.08\ kmol/m^3$	X = 0.875
$c_{20} = 0.1\ kmol/m^3$	*a*) 1 RCTA: V = ?
	b) 3 RCTA: $V_1, V_2, V_3 = ?$; $X_1, X_2, X_3 = ?$

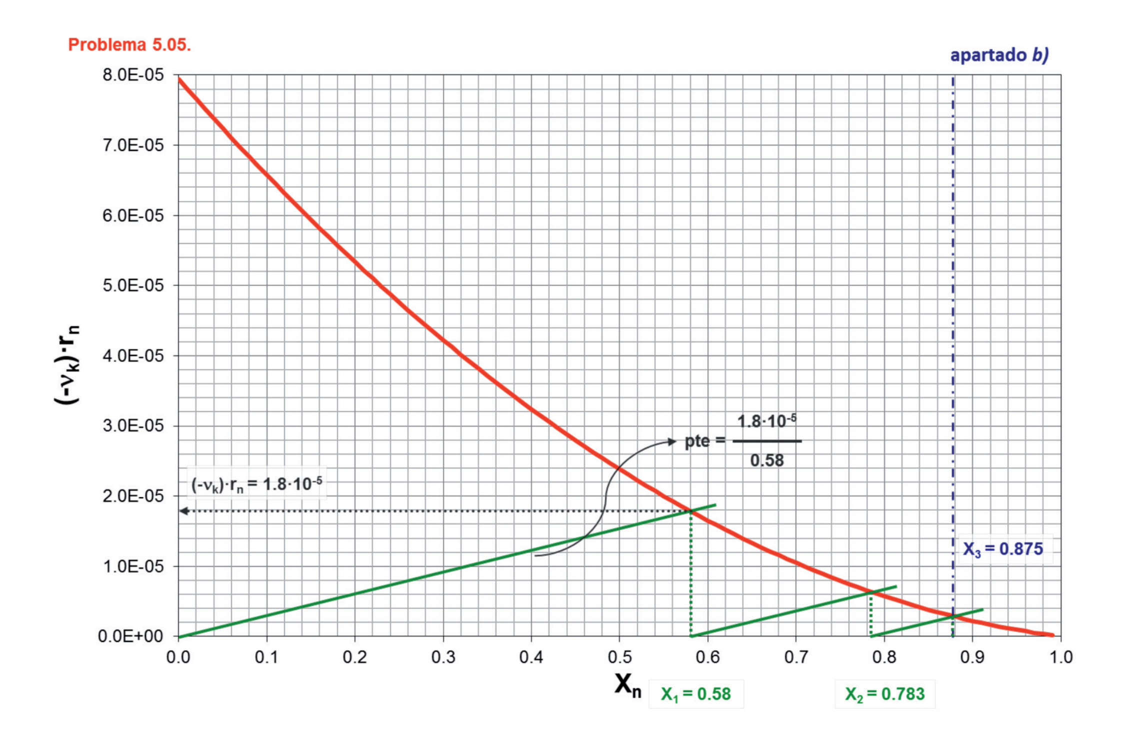


Figura 5.6. Cálculo del volumen de los RCTA: apartado *b*

SOLUCIÓN: *a*) $V = 6.54\ m^3$

b) $V_1 = V_2 = V_3 = 0.72\ m^3 \rightarrow V_T = 2.15\ m^3$

$X_1 = 0.580$

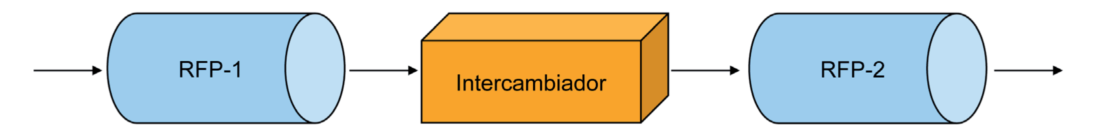
$X_2 = 0.783$

$X_1 = 0.875$

CAPÍTULO 6

Consideraciones sobre el funcionamiento de reactores continuos adiabáticos

Problema 6.01. En un sistema de dos reactores de flujo de pistón adiabáticos, en serie, con refrigeración entre ambos mediante un intercambiador de calor adecuado, según el esquema:



se quiere desarrollar la reacción reversible $SO_2(g) + 1/2\,O_2(g) \leftrightarrow SO_3(g)$ en presencia de un catalizador de V_2O_5 sobre un soporte de piedra pómez. Ambos reactores operan a la presión atmosférica y el alimento se introduce en el primer reactor a una temperatura de 760 K, con un caudal molar de 45 kmol/h y con la composición molar siguiente: SO_2 (A_1) (11 %), O_2 (A_2) (10%), SO_3 (A_3) (0 %) y N_2 (A_4) (79 %). La temperatura de salida del primer reactor es de 900 K. Calcular:

a) El volumen o masa de catalizador del primer reactor.
b) La temperatura a que debería enfriarse la mezcla que sale del primer reactor para que la conversión a la salida del segundo reactor sea máxima (admítase que ambos reactores contienen el mismo peso de catalizador).
c) El volumen o masa de catalizador que debería tener el segundo reactor si la temperatura de los gases se enfriara en el intercambiador de calor hasta 750 K y se deseara alcanzar un grado de conversión final de 0.71.

Datos y notas

La ecuación de velocidad referida al SO_2 es:

$$r = k \cdot \left[\frac{p_1}{p_3}\right]^{1/2} \cdot \left[p_2 - \left(\frac{p_3}{K_p \cdot p_1}\right)^2\right] \quad (\text{kmol / s} \cdot \text{kg de catalizador})$$

, que es aplicable para valores de grado de conversión superiores a 0.05. Para valores

inferiores del grado de conversión la velocidad de reacción permanece constante e igual al valor que se obtiene al sustituir las presiones parciales por su valor a X = 0.05 y la temperatura respectiva.

Para el intervalo de temperaturas comprendido entre 750 y 950 K la constante de velocidad y la de equilibrio pueden calcularse mediante las expresiones:

$$\ln k = \frac{-97782}{T} - 110.1 \cdot \ln T + 848.1 \text{ y } k = \exp\left[\frac{-97782}{T} - 110.1 \cdot \ln T + 848.1\right] (\text{kmol / s} \cdot \text{kg de catalizador} \cdot \text{atm})$$

$$K_p = 1.314 \cdot 10^{-5} \cdot \exp\left[\frac{11818}{T}\right] \quad \text{atm}^{-1/2}$$

La masa de catalizador y el volumen del reactor pueden relacionarse mediante $m_{cat} = \rho_{lecho} \cdot V$ en la que la densidad global del lecho catalítico vale 500 kg/m^3.

$$\Delta H_k^0 = -98370 \quad \text{kJ / kmol}$$

$$\bar{C}_{p1} = 54.4 \quad \text{kJ / kmol} \cdot \text{K} \quad \bar{C}_{p2} = 35.2 \quad \text{kJ / kmol} \cdot \text{K} \quad \bar{C}_{p3} = 83.7 \quad \text{kJ / kmol} \cdot \text{K} \quad \bar{C}_{p4} = 33.1 \quad \text{kJ / kmol} \cdot \text{K}$$

REACTOR

TIPO: RFP, ADIABÁTICO
Nº REACCIONES: 1
FASE: GAS

BALANCE DE MATERIA: $dV = F_{k_0} \cdot \frac{dX}{(-\nu_k) \cdot r}$

BALANCE DE ENERGÍA: $T = T_0 + J \cdot X$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 + \frac{1}{2} A_2 \overset{A_4}{\longleftrightarrow} A_3$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_K^0 = -98370 \text{ kJ/kmol}$$

$$\bar{C}_{p_1} = 54.4 \,,\; \bar{C}_{p_2} = 35.2 \,,\; \bar{C}_{p_3} = 83.7 \,,\; \bar{C}_{p_4} = 33.1 \quad \text{kJ/kmol} \cdot \text{K}$$

CINÉTICA: Para 750 K< T< 950 K:

$$k = \exp\left[\frac{-97782}{T} - 110.1 \cdot \ln T + 848.1\right] \quad (\text{kmol/s} \cdot \text{kg}_{\text{catalizador}} \cdot \text{atm})$$

$$K_p = 1.314 \cdot 10^{-5} \cdot \exp\left[\frac{11818}{T}\right] \quad (atm^{-1/2})$$

Para X>0.05:

$$r = k \cdot \left(\frac{p_1}{p_3}\right)^{1/2} \cdot \left[p_2 - \left(\frac{p_3}{K_p \cdot p_1}\right)^2\right]$$

RESULTADOS

ENTRADA	REACTOR
$x_{10} = 0.11$, $x_{20} = 0.10$, $x_{30} = 0$, $x_{40} = 0.79$	*a*) $V_1 = ?$
$P_0 = P = 1$ atm ; $T_0 = 760$ K	*b*) $V_1 = V_2 \rightarrow \overline{T}_2 = ?$ (si X_2 = max)
$F_{t0} = 45$ kmol/h º 0.0125 kmol/s	*c*) $V_1 \neq V_2 \rightarrow V_2 = ?$ (si $T_2 = 750$ K y $X_2 = 0.71$)
$m_{cat} = r_{lecho} \cdot V \rightarrow r_{lecho} = 500$ kg/m3	

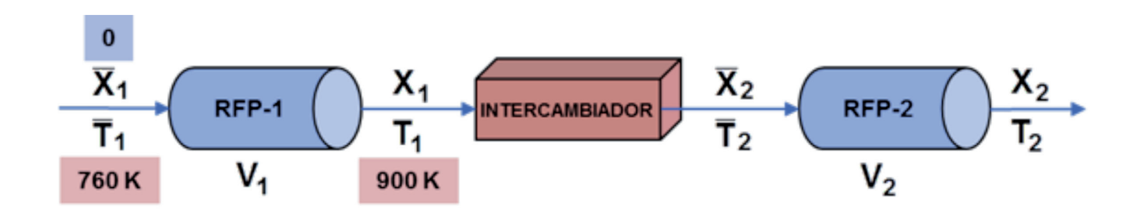


Figura 6.1. Esquema del sistema de reactores de flujo de pistón

RESULTADOS

→ CASO 1 (apartados *a* y *b*)

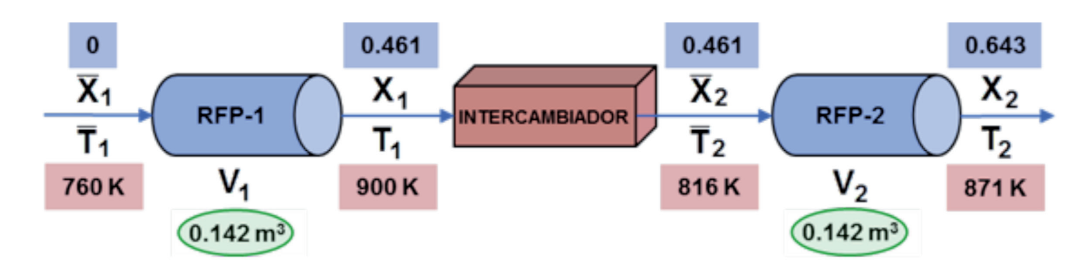


Figura 6.2. Valores de los diferentes parámetros del sistema de reactores para el Caso 1 (apartados *a* y *b*)

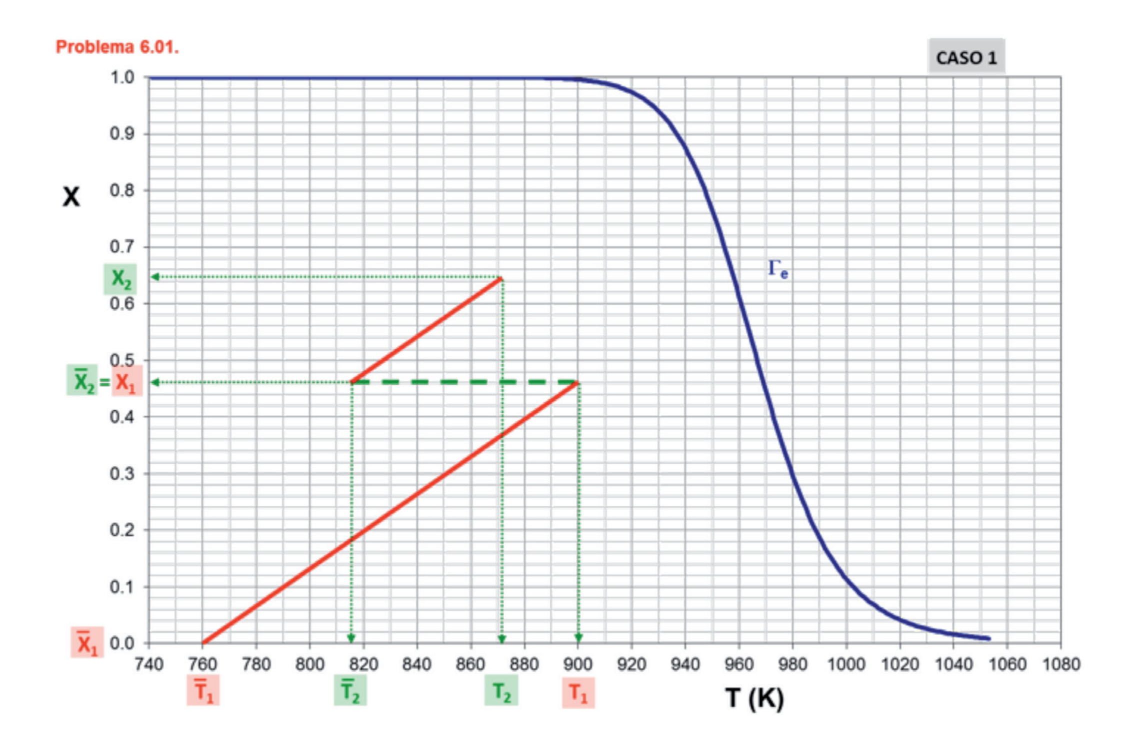


Figura 6.3. Valores de los diferentes parámetros del sistema de reactores para el Caso 1 (apartados *a* y *b*)

Tabla 6.1. Evolución del grado de conversión final alcanzado con la variación de la temperatura de entrada al segundo reactor (apartado *b*)

$\overline{T}_2$ (K)	X_2
710	0.479
730	0.500
750	0.535
770	0.580
790	0.622
810	0.642
850	0.618
830	0.637
870	0.591

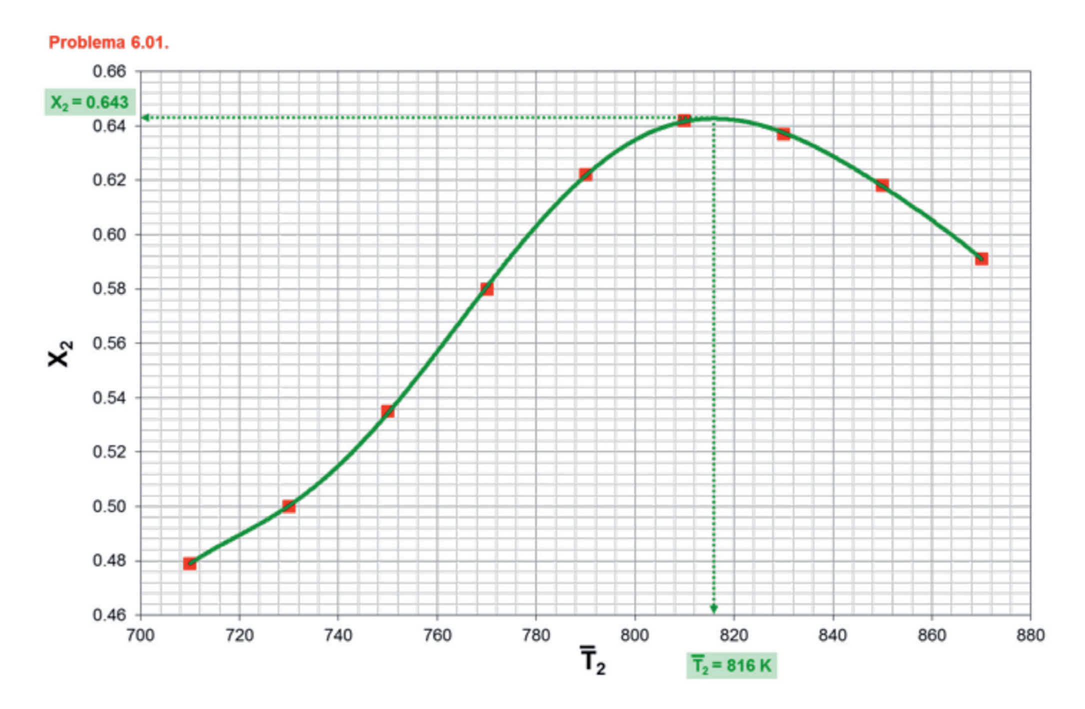


Figura 6.4. Evolución del grado de conversión final alcanzado con la variación de la temperatura de entrada al segundo reactor (apartado *b*)

→ CASO 2 (apartado *c*)

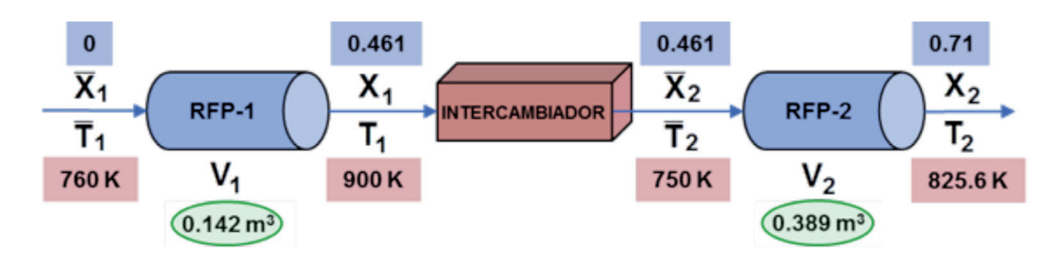


Figura 6.5. Valores de los diferentes parámetros del sistema de reactores para el Caso 2 (apartado *c*)

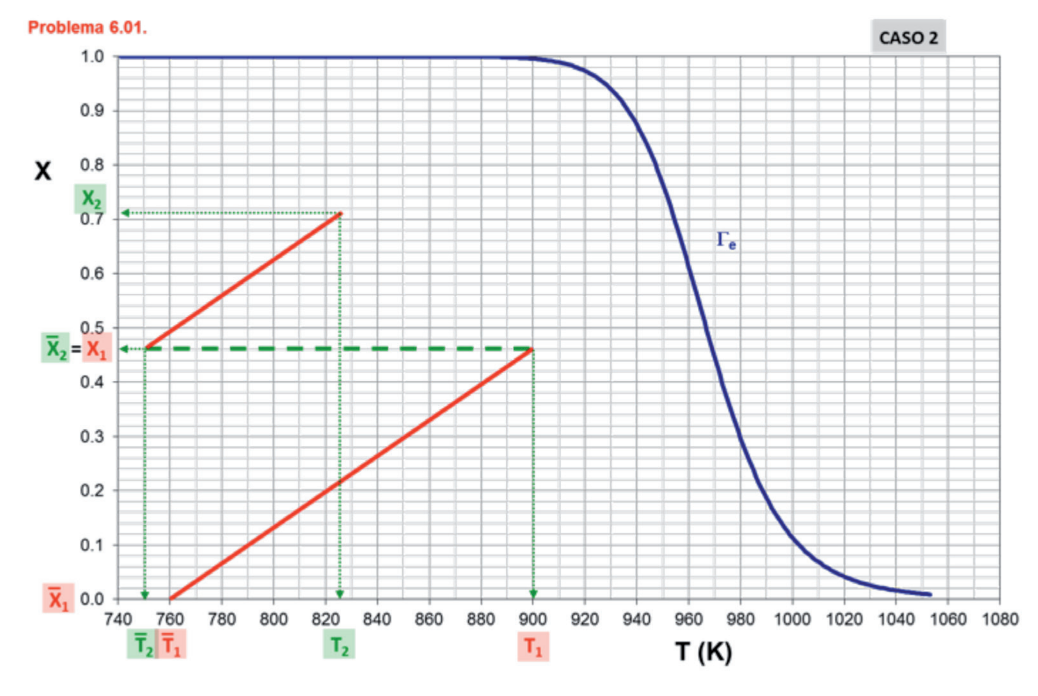


Figura 6.6. Valores de los diferentes parámetros del sistema de reactores para el Caso 2 (apartado c)

SOLUCIÓN: ***a***) $V_1 = 0.142$ m³ ≡ 71 kg catalizador

b) $T_2 = 816$ K

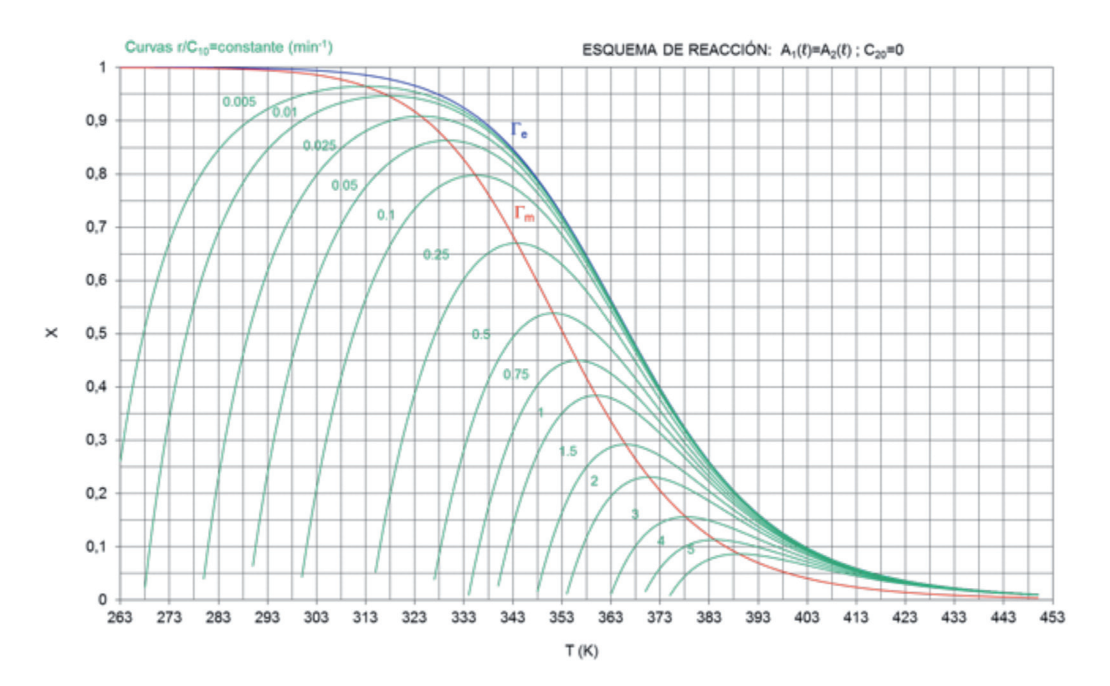
c) $V_2 = 0.389$ m³ ≡ 194.5 kg catalizador

Problema 6.02. Se pretende desarrollar la reacción reversible de primer orden $A_1(\ell) \leftrightarrow A_2(\ell)$ en uno o varios RCTA adiabáticos, partiendo de una corriente exenta de A_2 y con una concentración de A_1 igual a c_{10}. Se dispone de los siguientes datos de la reacción:

$$K = 1.8747 \cdot 10^{-11} \cdot \exp\left[\frac{9058}{T}\right] \qquad \Delta H_k^o = -75312 \quad \text{kJ / kmol a 298K}$$

$$k_1 = 2.9503 \cdot 10^{7} \cdot \exp\left[-\frac{5837.4}{T}\right] \quad (\text{min}^{-1}) \quad k_2 = 1.5738 \cdot 10^{18} \cdot \exp\left[-\frac{14895.4}{T}\right] \quad (\text{min}^{-1})$$

a) Construir la gráfica con X *versus* T de las curvas de velocidad de reacción constante, de la curva de velocidad máxima de reacción y de la curva de equilibrio comprobando que tiene la siguiente forma:



b) Si la corriente de alimento a un RCTA adiabático consiste en una disolución acuosa de la especie A_1 con c_{10} = 5 kmol/m³, F_{10} = 1 kmol/min y T_0 = 5 °C, pudiéndose admitir que el calor específico medio de la disolución coincide con el del agua (recuérdese que para el agua ρ = 1000 kg/m³, M = 18 kg/kmol y C_p = 4.184 kJ/kg · K):

i) Calcular el valor de J y escribir la ecuación de la recta adiabática.

ii) Calcular el volumen del RCTA si la velocidad de reacción fuera la máxima posible para el grado de conversión que se alcance. Determinar la pareja de valores X,T a la que trabajará el RCTA. Dibujar en la gráfica de velocidad de reacción constante la recta adiabática y el estado estacionario.

iii) Calcular el volumen del RCTA si la velocidad de reacción fuera la máxima posible para la temperatura de alimentación. Determinar la pareja de valores X,T a la que trabajará el RCTA. Dibujar en la gráfica de velocidad de reacción constante la recta adiabática y el estado estacionario.

c) Si las condiciones de entrada del alimento fueran las citadas en el apartado anterior, excepto la temperatura del alimento que es ahora de 25 °C, y se dispone de tres RCTA adiabáticos, completar la siguiente tabla para obtener el menor volumen de reacción posible. Dibujar en la gráfica de las curvas de velocidad de reacción constante las correspondientes rectas adiabáticas y, según proceda, de enfriamiento o calentamiento.

RCTA	**T_0 (K)**	**X**	**T (K)**	**r ($kmol/m^3 \cdot min$)[1]**	**V (m^3)[2]**
1					
2		0.75			
3		0.9			

[1] Indicar cómo se ha procedido para el cálculo de r.

[2] Indicar cómo se ha procedido para calcular V y determinar el volumen mínimo.

REACTOR

TIPO: 1 RCTA ó 3 RCTA, ADIABÁTICOS
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA:
$$\begin{cases} c_{k_0} \cdot (X_n - \overline{X}_n) + \nu_k \cdot r_n \cdot \tau = 0 \\ c_{k_0} \cdot X + \nu_k \cdot r \cdot \tau = 0 \end{cases}$$

BALANCE DE ENERGÍA:
$$\begin{cases} T_n = \overline{T}_n + J \cdot (X_n - \overline{X}_n) \\ T = T_0 + J \cdot X \end{cases}$$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \leftrightarrow A_2$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

$$\Delta H_K^0 = -75312 \text{ kJ/kmol} \quad (\text{a } 298 \text{ K})$$

CINÉTICA:

$$K = 1.8747 \cdot 10^{-11} \cdot \exp\left[\frac{9058}{T}\right]$$

$$k_1 = 2.9503 \cdot 10^{7} \cdot \exp\left[-\frac{5837.4}{T}\right] \quad (\text{min}^{-1})$$

$$k_2 = 1.5738 \cdot 10^{18} \cdot \exp\left[-\frac{14895.4}{T}\right] \quad (\text{min}^{-1})$$

DATOS Y NOTAS

a)	*b)* 1 RCTA	*c)* 3 RCTA
c_{10}	c_{10} = 5 kmol/m³	c_{10} = 5 kmol/ m³
$c_{20} = 0$	F_{10} = 1 kmol/min	F_{10} = 1 kmol/min
a₁) ¿X = f(T)?	T_0 = 5 °C = 278 K	T_0 = 25 °C = 298 K
a₂) ¿Γ_e?	r = 1000 kg/m³, C_p = 4.184 kJ/kg·K	*c₁)* ¿Tabla?
a₃) ¿Γ_m?	M = 18 kg/kmol	
	b₁) J = ?	
	b₂) V = ? (r_{max} para X)	
	b₃) V = ? (r_{max} para T_0)	

RESULTADOS

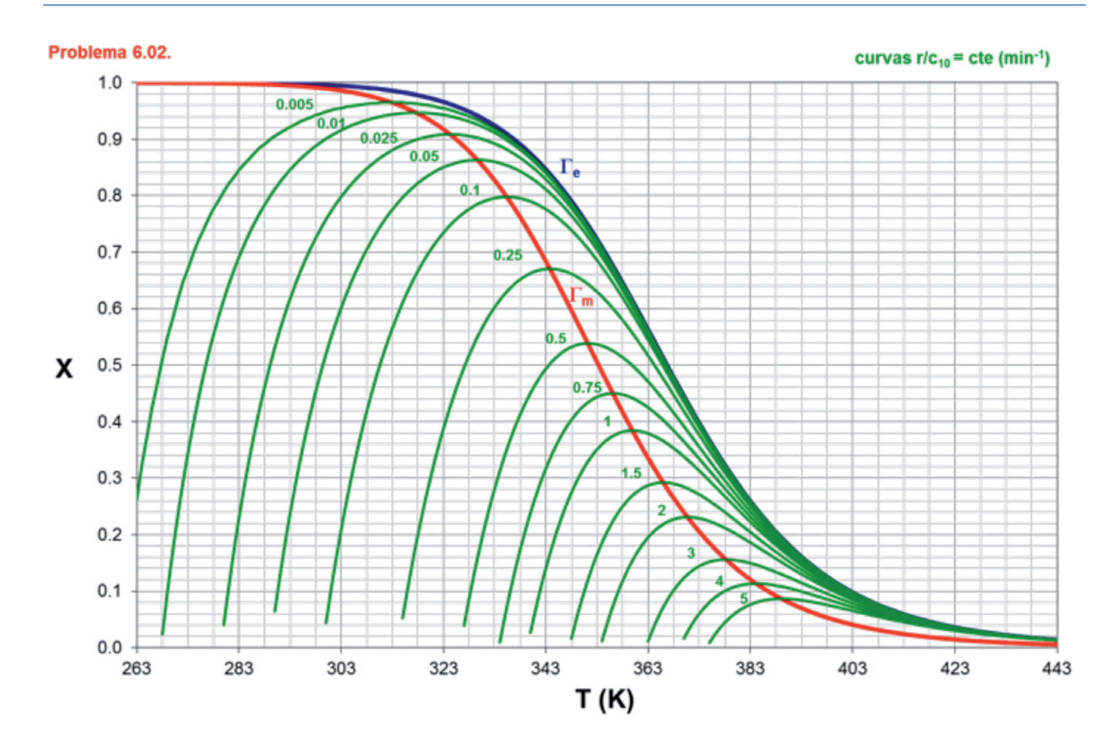


Figura 6.7. Evolución del grado de conversión con la temperatura, incluyendo las curvas G_e y G_m: apartado *a*

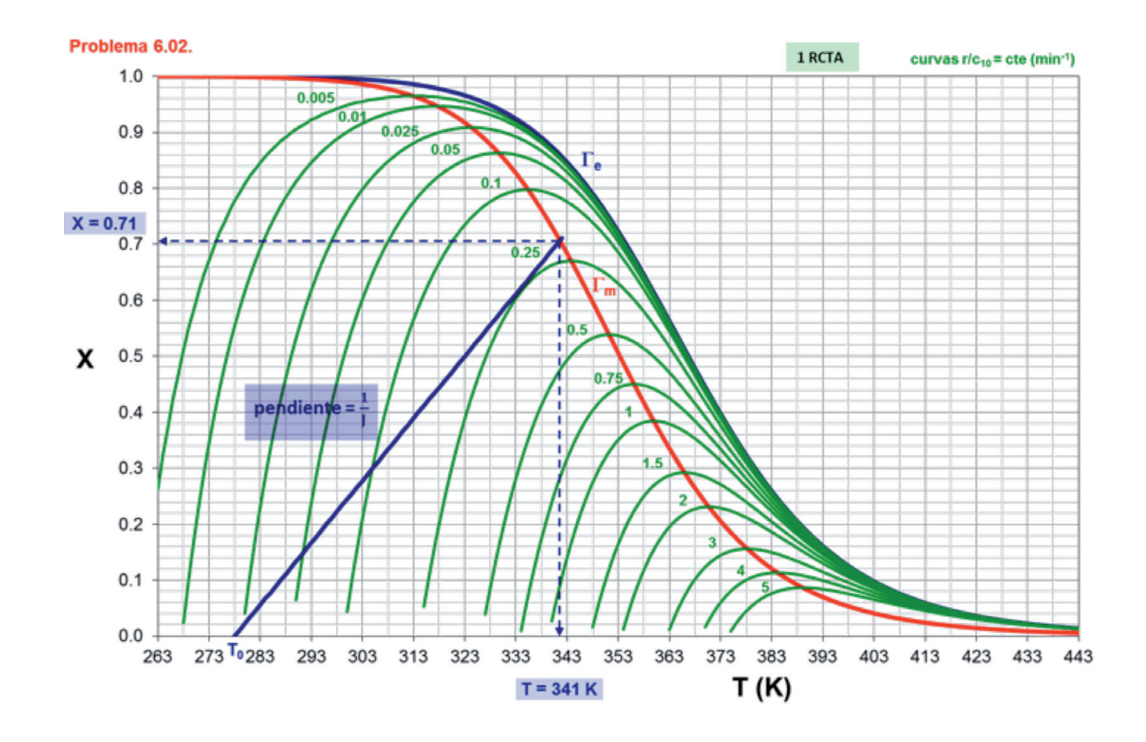


Figura 6.8. Cálculo del volumen del reactor: r_{max} para X (apartado b_2)

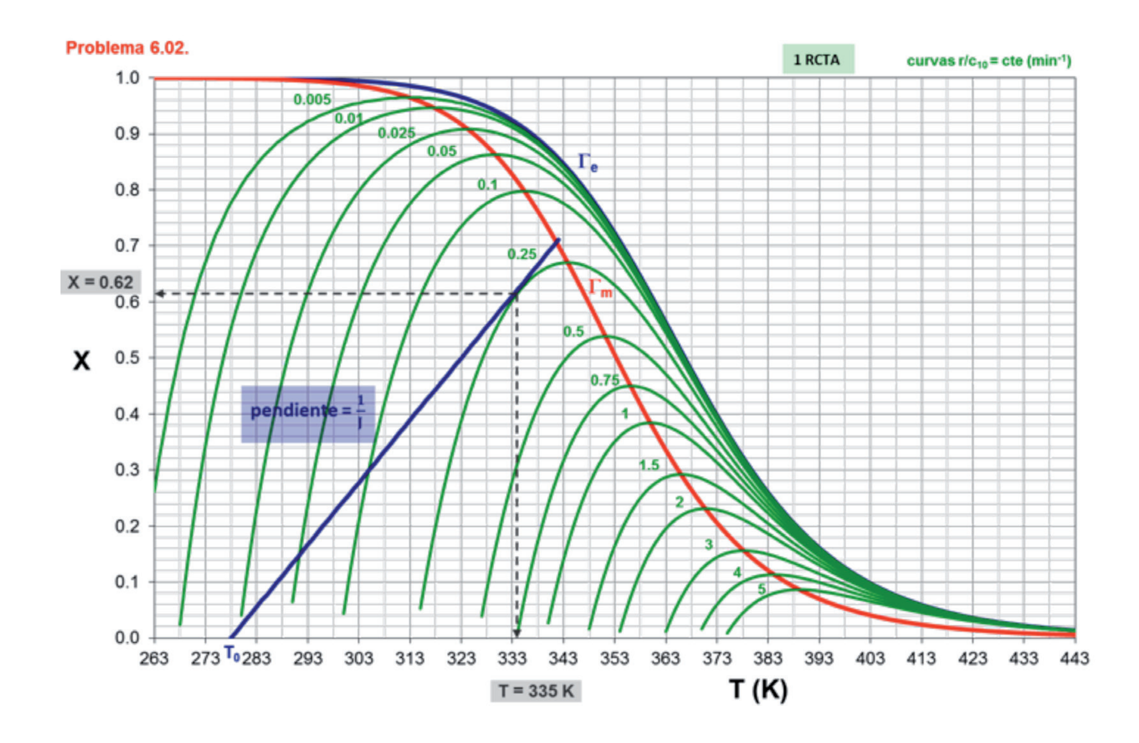


Figura 6.9. Cálculo del volumen del reactor: r_{max} para T_0 (apartado b_3)

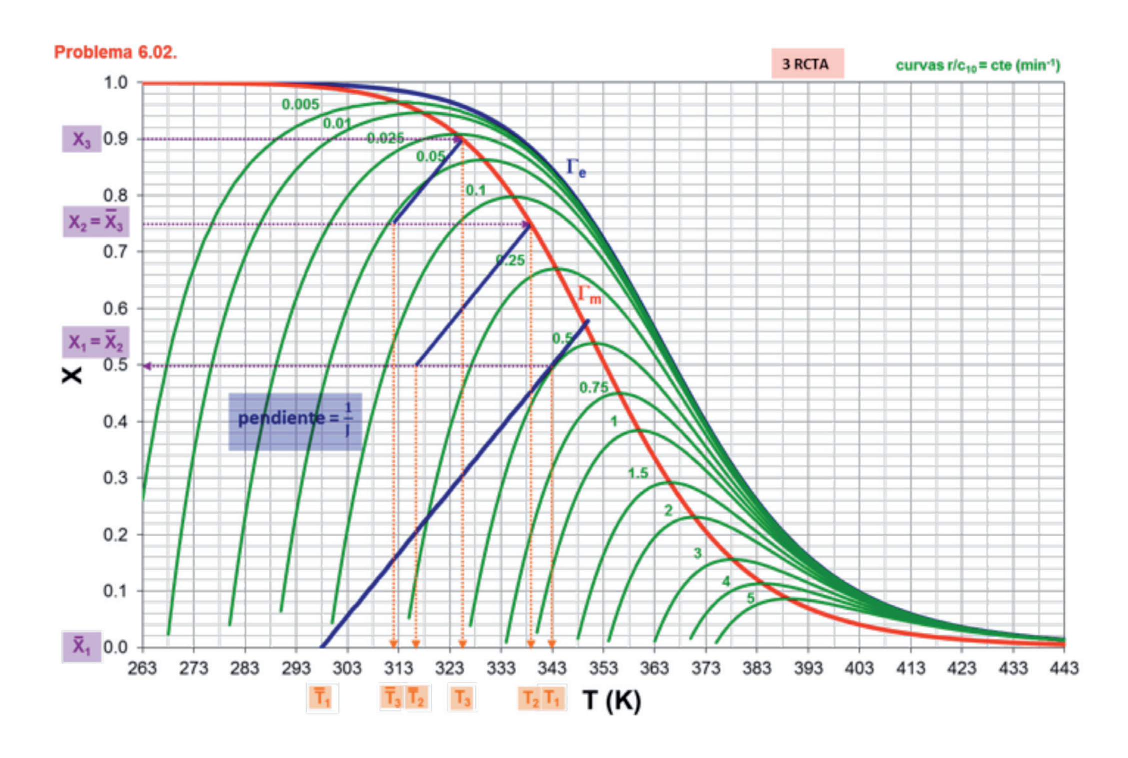


Figura 6.10. Cálculos para el caso de 3 RCTA (apartado *c*)

Tabla 6.2. Parámetros calculados para el sistema de 3 RCTA en serie

RCTA	T_0 (K)	X	T (K)	r ($kmol/m^3 \cdot min$)(1)	V (m^3)(2)
1	298	0.5	343.0	2.5	0.2
2	316	0.75	338.5	0.74	0.34
3	311	0.9	325.0	0.145	1.03

(1) $r = (r/c_{10}) \cdot c_{10}$

(2) $V = \dfrac{F_{10} \cdot \Delta X}{r}$

SOLUCIÓN: ***a₁***) **X = f(T) (ver Figura 6.7.)**

a₂) **Γ_e (ver Figura 6.7.)**

a₃) **Γ_m (ver Figura 6.7.)**

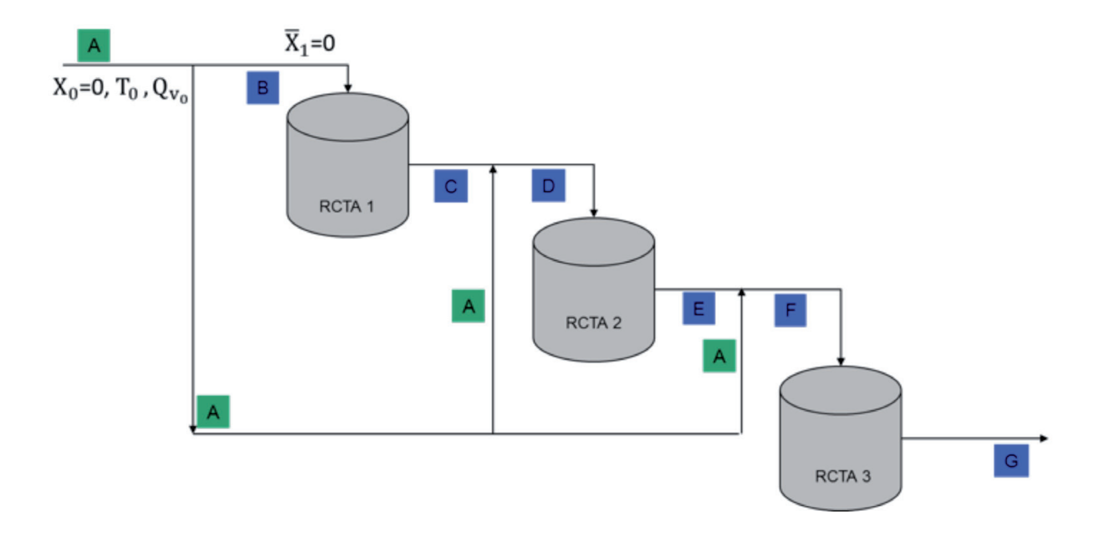
b₁) **J = 90 K**

b₂) **V = 0.72 m^3 (r_{max} para X) (ver Figura 6.8.)**

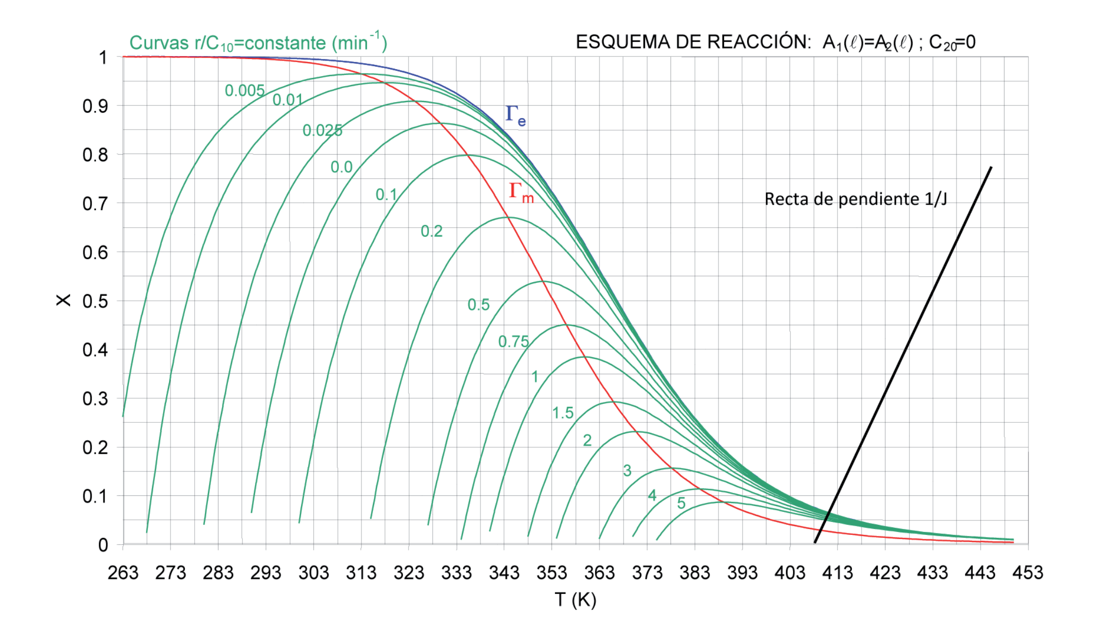
b₃) **V = 0.50 m^3 (r_{max} para T_0) (ver Figura 6.9.)**

c) **ver Tabla 6.2.**

Problema 6.03. Se pretende desarrollar la reacción exotérmica reversible de primer orden $A_1(\ell) \leftrightarrow A_2(\ell)$ en tres RCTA adiabáticos, partiendo de una corriente exenta de A_2. El reactivo A_1 se encuentra a la temperatura de 283 K y parte de él se va a utilizar como refrigerante, inyectándolo a la salida de los reactores n = 1 y n = 2. Se ha encontrado que, para minimizar el volumen total de reacción, es conveniente que en el primer reactor se alcance un grado de conversión de 0.3 y en el segundo de 0.5, de forma que se pueda alcanzar un grado de conversión final de 0.8. El esquema de funcionamiento de los tres RCTA es:



En la siguiente figura se muestran las correspondientes curvas de velocidad de reacción constante, junto con una recta de pendiente 1/J.



a) Situar cuidadosamente en la figura los puntos A, B, C, D, E, F, G marcados en el esquema de funcionamiento.

b) Calcular, realizando la construcción gráfica necesaria, los grados de conversión a la entrada de los reactores n = 2 y n = 3 y las temperaturas de las corrientes a la entrada a los reactores n = 1, n = 2 y n = 3.

c) Determinar las temperaturas de reacción en los reactores n = 1, n = 2 y n = 3.

d) Si se dispone de un caudal volumétrico de Q_{v0}= 1000 l/h, calcular los caudales volumétricos (Q_{v1}, Q_{v2}, Q_{v3}) con que se alimenta cada uno de los tres reactores. Justificar los cálculos.

REACTOR

TIPO: 3 RCTA ADIABÁTICOS
Nº REACCIONES: 1
FASE: LÍQUIDA

BALANCE DE MATERIA: $c_{k_0} \cdot (X_n - \overline{X}_n) + \nu_k \cdot r_n \cdot \tau = 0$

BALANCE DE ENERGÍA: $T_n = \overline{T}_n + J \cdot (X_n - \overline{X}_n)$

REACCIÓN

ESQUEMA: $A_1 \leftrightarrow A_2$

TERMODINÁMICA: EXOTÉRMICA

DATOS Y NOTAS

ENTRADA	REACTORES
$x_{10} = 1$	$X_1 = 0.3$
$T_0 = 283$ K	$X_2 = 0.5$
$Q_{v0} = 1000$ l/h	$X_3 = 0.8$
	a) situar A, B, C, D, E, F y G
	b) $\overline{X}_2, \overline{X}_3 = ?$ y $\overline{T}_1, \overline{T}_2, \overline{T}_3 = ?$
	c) $T_1, T_2, T_3 = ?$
	d) $Q_{v1}, Q_{v2}, Q_{v3} = ?$

RESULTADOS

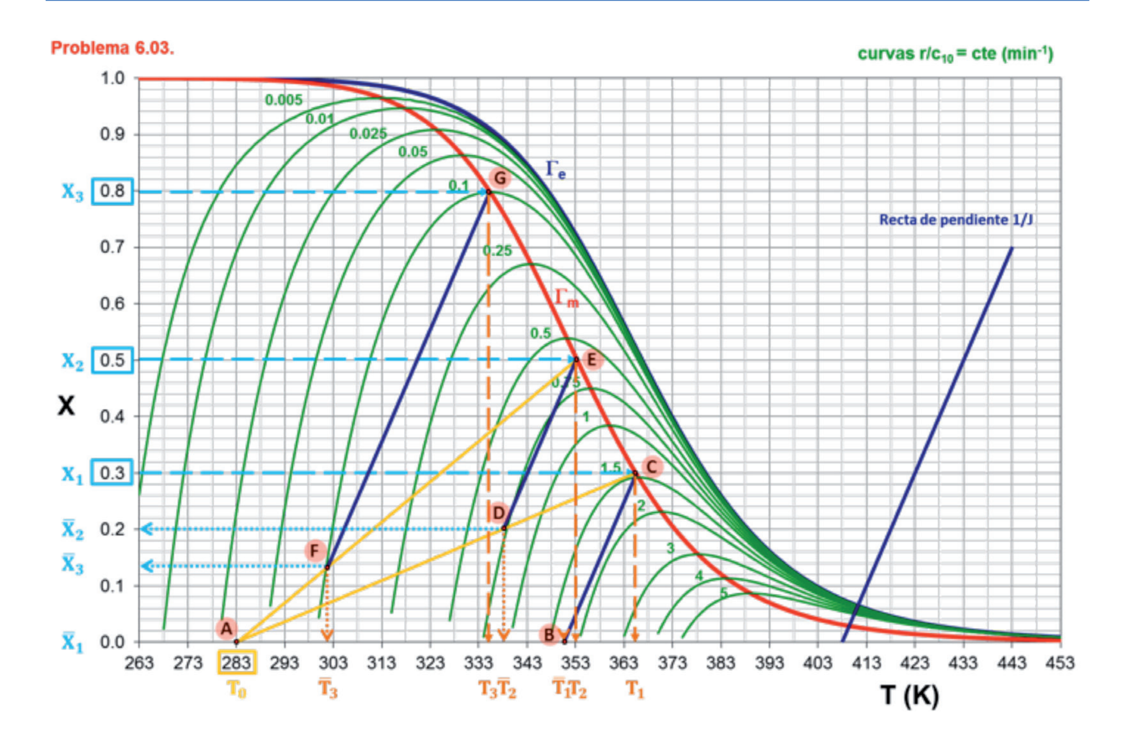


Figura 6.11. Evolución del grado de conversión con la temperatura: puntos A, B, C, D, E, F y G (apartado *a*)

SOLUCIÓN: ***a*) Puntos A, B, C, D, E, F y G (ver Figura 6.11.)**

***b*) $\overline{X}_2 = 0.2$, $\overline{X}_3 = 0.135$ (puntos D y F de la Figura 6.11.)**

$\overline{T}_1 = 351$ K, $\overline{T}_2 = 338$ K, $\overline{T}_3 = 302$ K (puntos B, D y F de la Figura 6.11.)

***c*) $T_1 = 365$ K, $T_2 = 353$ K, $T_3 = 335$ K (puntos C, E y G de la Figura 6.11.)**

***d*) $Q_{v1} = 179$ l/h, $Q_{v2} = 265$ l/h, $Q_{v3} = 1000$ l/h**

Bibliografía

Bibliografía básica

ARIS, Rutherford, *Elementary chemical reactor analysis*, Boston [etc.], Butterworths cop., 1989.

— *Análisis de reactores* [versión castellana de José Costa López], Madrid [etc.], Alhambra, 1973.

ATKINSON, Bernard, *Reactores bioquímicos* [versión castellana de Juan Mata Álvarez y José Costa López], Barcelona, Reverté, S. A., 1986.

ESCARDINO, Agustín, *Introducció a l'enginyeria dels reactors químics*, València, Universitat de València, 2003.

FOGLER, H. Scott, *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas* [versión castellana de Roberto Luis Escalona García], México [etc.], Pearson Educación 2001.

LEVENSPIEL, Octave, *El omnilibro de los reactores químicos* [versión castellana de J. Costa López y L. Puigjaner Corbella], Barcelona, Reverté cop. 1986.

— *Ingeniería de las reacciones químicas* [versión castellana de Gabriel Tojo Barreiro], Barcelona [etc.], Reverté cop., 1990.

Bibliografía complementaria

BELFIORE, Lawrence A., *Transport phenomena for chemical reactor design*, Hoboken, NJ Wiley & Sons cop., 2003.

BUTT, John B., *Reaction kinetics and reactor design*, Englewood Cliffs, N.J. Prentice-Hall cop., 1980.

CARBERRY, J. J., Varma, A., *Chemical reaction and reactor engineering*, New York, Marcel Dekker, 1986.

COKER, A. Kayode, *Modeling of chemical kinetics and reactor design*, Boston [etc.], Gulf Professional Publishing cop., 2001.

DAVIS, M.E., Davis, R. J., *Fundamentals of chemical reaction engineering*, Boston, McGraw-Hill, 2003.

DENBIGH, Kenneth George, *Chemical reactor theory an introduction*, Cambridge [Cambridgeshire], Nueva York, Cambridge University Press.

DORAISWAMY, L. K. y SHARMA, M. M., *Heterogeneous reactions: analysis, examples and reactor design*, Nueva York [etc.], John Wiley and Sons, 1984.

FOGLER, H. Scott, *Elements of chemical reaction engineering*, Upper Saddle River, NJ Prentice Hall, 2001.

FROMENT, Gilbert F., *Chemical reactor analysis and design*, Nueva York, John Wiley & Sons cop., 1990.

GONZÁLEZ-VELASCO, J. R. *et. al.*, *Cinética química aplicada*, Madrid, Editorial Síntesis, S. A., 1999.

HILL, Charles G., *An introduction to chemical engineering kinetics & reactor design*, New York, John Wiley & Sons cop., 1977.
HOLLAND, Charles D., *Fundamentals of chemical reaction engineering*, Englewood Cliffs, NJ Prentice-Hall cop., 1989.
JOSHI, J. B., DORAISWAMY, L. K., *Chemical reaction* engineering, Chapter 11, en *Chemical Engineers' Handbook*, CRC Press, Boca Raton, FL, Ed. L. F. Albright, 2009.
LEE, H. H., *Heterogeneous reactor design*, Boston, Butteworth, 1984.
LEVENSPIEL, Octave, *The chemical reactor minibook*, Corvallis, Oregon [s.n.], OSU Bookstores cop., 1979.
MISSEN, Ronald W., *Introduction to chemical reaction engineering and kinetics*, 1999.
NAUMAN, E. B., *Chemical reactor design*, Nueva York, Wiley cop., 1987.
PETERSEN, E. E., *Chemical reaction analysis*, Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1965.
RODRIGUEZ-RENUNCIO, J. A., *et. al.*, *Termodinámica química*, Madrid, Editorial Síntesis, S. A., 1999.
SANTAMARÍA, Jesús, et. al., *Ingeniería de reactores*, Madrid, Editorial Síntesis, S. A., 1999.
SCHMIDT, Lanny D., *The engineering of chemical reactions*, Nueva York [etc.], Oxford University Press, 1998.
SMITH, J. M., *Introduction to chemical engineering thermodynamics*, Nueva York [etc.], McGraw-Hill, 2001.
THOENES, Dirk, *Chemical reactor development: from laboratory synthesis to industrial production*, Dordrecht [etc.], Kluwer Academic Publishers cop., 1994.
WALAS, Stanley M., *Chemical reaction engineering handbook of solved problems*, Australia [etc.], Gordon and Breach cop., 1995.
— *Reaction kinetics for chemical engineers*, Boston, Butterworths cop., 1989.
WESTERTERP, K. R., *Chemical reaction and reactor design*, Chischester [etc.], John Wiley, 1997.